Document made available under the Patent Cooperation Treaty (PCT)

International application number: PCT/EP04/053709

International filing date: 27 December 2004 (27.12.2004)

Document type: Certified copy of priority document

Document details: Country/Office: DE

Number: 10 2004 005 919.5

Filing date: 06 February 2004 (06.02.2004)

Date of receipt at the International Bureau: 02 February 2005 (02.02.2005)

Remark: Priority document submitted or transmitted to the International Bureau in

compliance with Rule 17.1(a) or (b)



BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND



Prioritätsbescheinigung über die Einreichung einer Patentanmeldung

Aktenzeichen:

10 2004 005 919.5

Anmeldetag:

6. Februar 2004

Anmelder/Inhaber:

Siemens Aktiengesellschaft, 80333 München/DE

Bezeichnung:

Rechnergestütztes Modellierverfahren für das

Verhalten eines Stahlvolumens mit einer Volumen-

oberfläche

IPC:

C 21 D 1/00

Die angehefteten Stücke sind eine richtige und genaue Wiedergabe der ursprünglichen Unterlagen dieser Patentanmeldung.

> München, den 9. November 2004 **Deutsches Patent- und Markenamt** Der Präsident **Im Auftrag**

> > Klostermeyer



Beschreibung

Rechnergestütztes Modellierverfahren für das Verhalten eines Stahlvolumens mit einer Volumenoberfläche

5

Die vorliegende Erfindung betrifft ein rechnergestütztes Modellierverfahren für das Verhalten eines Stahlvolumens mit einer Volumenoberfläche,

10

- wobei ein Rechner anhand eines momentanen Anfangszustands des Stahlvolumens und mindestens einer über die Volumenoberfläche auf das Stahlvolumen einwirkenden momentanen Einflussgröße durch Lösen einer Wärmeleitungsgleichung und einer Phasenumwandlungsgleichung einen Folgezustand des Stahlvolumens ermittelt,

15

- wobei die mindestens eine Einflussgröße für eine Anzahl von Flächenelementen der Volumenoberfläche jeweils einen lokalen Einfluss umfasst und die lokalen Einflüsse über das jeweilige Flächenelement auf das Stahlvolumen einwirken,

20

- wobei der Anfangszustand und der Folgezustand für eine Anzahl von Volumenelementen des Stahlvolumens jeweils lokale Anteile von modellierten Phasen des Stahls und eine einen lokalen Energieinhalt des Stahls beschreibende Größe umfassen,



- wobei die modellierten Phasen des Stahls Austenit und eine erste weitere Phase umfassen, in die Austenit umwandelbar ist und die in Austenit umwandelbar ist.

Ein derartiges Modellierverfahren ist z. B. aus der DE-A-101 29 565 bekannt. Bei dieser Schrift wird insbesondere erstmals versucht, die Fouriersche Wärmeleitungsgleichung selbst und nicht eine unkorrekte Abwandlung dieser Wärmeleitungsgleichung zu lösen, um das thermodynamische Verhalten eines Stahlbandes korrekt zu beschreiben. Diese Schrift wird hiermit durch Verweis auf sie in den Offenbarungsgehalt der vorliegenden Erfindung mit aufgenommen.

10

15

20

30

35

In der älteren, zum Anmeldezeitpunkt der vorliegenden Erfindung nicht vorveröffentlichten deutschen Patentanmeldung 102 51 716.9 ist ebenfalls ein derartiges Modellierverfahren beschrieben. Bei diesem Modellierverfahren wird versucht, die Phasenumwandlung des Stahls anhand der Gibbsschen freien Enthalpien des Stahls zu modellieren. Auch diese Schrift wird hiermit durch Verweis auf sie in den Offenbarungsgehalt der vorliegenden Erfindung mit aufgenommen.

Weiterhin ist ein derartiges Modellierverfahren z. B. aus dem Aufsatz "Numerische Simulation der Wärmeleitung in Stahlblechen – Mathematik hilft bei der Steuerung von Kühlstrecken" von W. Borchers et al., veröffentlicht im Unikurier der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Heft 102, Oktober 2001, 27. Jahrgang, bekannt.

Schließlich sind noch die traditionellen Ansätze gemäß der Scheilschen Regel, nach Johnson-Mehl-Avrami und Brimacombe bekannt.

Bereits die exakte Modellierung des zeitlichen Temperaturverlaufs von Stahl bei der Abkühlung, insbesondere von Stahlbändern, ist entscheidend für die Steuerung der erforderlichen
Wasser- bzw. Kühlmittelmengen einer Kühlstrecke für Stahl.
Denn die beim Abkühlen auftretende Stahlumwandlung beeinflusst entscheidend das thermische Verhalten des Stahls bei
der Abkühlung. Auch werden durch den Abkühlprozess wesentliche Materialeigenschaften des Stahls beeinflusst. Da die Abkühlung aber nicht im thermodynamischen Gleichgewicht erfolgt, ist es nicht möglich, die Umwandlung einfach durch geeignete Anpassung der Wärmekapazität zu beschreiben. Daher
ist zusätzlich eine exakte Modellierung der Phasenumwandlung
des Stahls erforderlich, um die Kühlstrecke korrekt steuern
zu können.

Die traditionellen Ansätze des Standes der Technik arbeiten in der Praxis nicht in allen Fällen fehlerfrei. Insbesondere

5

10

15

20

weisen sie eine Reihe von systematischen Nachteilen auf. Zum Ersten muss jedes Material separat parametriert werden. Interpolationen zwischen verschiedenen Materialien sind nicht oder zumindest nur eingeschränkt möglich. Zum Zweiten werden bei den traditionellen Verfahren des Standes der Technik nur zwei Phasen betrachtet. Eine Erweiterung auf mehr als zwei Phasen ist systembedingt nicht möglich. Zum Dritten liefern die Verfahren des traditionellen Standes der Technik nur bei einer vollständigen Umwandlung des betrachteten Metalls eine gute Übereinstimmung zwischen Modell und Realität. Zum Vierten liefern die Verfahren des traditionellen Standes der Technik keine Information über die bei der Phasenumwandlung freigesetzte Umwandlungswärme. Die Kenntnis der Umwandlungswärme ist für ein korrektes Lösen der Wärmeleitungsgleichung aber unabdingbar.

Die Vorgehensweisen gemäß der DE-A-101 29 565 und dem Fachaufsatz "Numerische Simulation ..." stellen dem gegenüber bereits einen erheblichen Fortschritt dar, da sie zumindest die
Wärmeleitung völlig korrekt beschreiben. Die ältere deutsche
Patentanmeldung verbessert darüber hinaus die Modellierung
der Phasenumwandlung. Insbesondere liefert sie bereits die
bei der Phasenumwandlung auftretende Umwandlungswärme. Auch
diese Verfahren sind aber noch verbesserungsfähig.

Die Aufgabe der vorliegenden Erfindung besteht darin, ein Modellierverfahren für ein Metall zu schaffen, das bessere Modellergebnisse liefert.

- 30 Die Aufgabe wird dadurch gelöst,
 - dass der Anfangszustand und der Folgezustand für mindestens eines der Volumenelemente auch eine lokale Konzentrationsverteilung mindestens eines im Stahl beweglichen Legierungselements umfassen,
- dass im Rahmen der Umwandlungsgleichung für das mindestens eine Volumenelement ermittelt wird, welche Konzentrationen des mindestens einen beweglichen Legierungselements beid-

15

20

30

35

seits einer ersten Phasengrenze zwischen Austenit und der ersten weiteren Phase vorliegen,

- dass durch Lösen eines ersten Stefan-Problems ermittelt wird, ob und wie sich die Konzentrationsverteilung des mindestens einen beweglichen Legierungselements im austenitischen Bereich des betrachteten Volumenelements ändert und ob und um welches Ausmaß sich die erste Phasengrenze dadurch verschiebt, und
- dass die lokalen Anteile der Phasen anhand einer durch das 10 Ausmaß der Verschiebung der ersten Phasengrenze bestimmten Lage der ersten Phasengrenze ermittelt werden.

Das in Stahl bewegliche Legierungselement ist in der Regel Kohlenstoff. Alternativ oder zusätzlich ist es aber auch möglich, dass das Legierungselement Stickstoff ist. Es kann auch ein anderes Legierungselement sein, das in Stahl bevorzugt an Zwischengitterplätzen angeordnet ist.

Bereits dieses Modellierverfahren ermöglicht gegenüber dem bisher bekannten Stand der Technik einen deutlichen Fortschritt. Denn mit dieser Vorgehensweise kann – je nach dem, ob die weitere Phase Ferrit oder Zementit ist – das Umwandlungsverhalten von Austenit in Ferrit bzw. von Austenit in Zementit und umgekehrt sehr realitätsgetreu modelliert werden.

Vorzugsweise umfassen die modellierten Phasen des Stahls auch eine zweite weitere Phase, in die Austenit umwandelbar ist und die in Austenit umwandelbar ist. Denn dann ist es insbesondere möglich,

- dass für das betrachtete Volumenelement im Rahmen der Umwandlungsgleichung auch ermittelt wird, welche Konzentrationen des mindestens einen beweglichen Legierungselements beidseits einer zweiten Phasengrenze zwischen Austenit und der zweiten weiteren Phase vorliegen,
- dass durch zusätzliches Lösen eines zweiten Stefan-Problems ermittelt wird, ob und wie sich die Konzentrationsvertei-

15

20

30

35

lung des mindestens einen beweglichen Legierungselements im austenitischen Bereich des betrachteten Volumenelements ändert und ob und um welches Ausmaß sich die zweite Phasengrenze dadurch verschiebt,

- 5 dass die Stefan-Probleme miteinander gekoppelt sind,
 - dass den Phasengrenzen Flächenmaße zugeordnet sind,
 - dass ein Anteil des der zweiten Phasengrenze zugeordneten Flächenmaßes an der Summe der Flächenmaße bestimmt wird und
 - dass die lokalen Anteile der Phasen auch vom Anteil des der zweiten Phasengrenze zugeordneten Flächenmaßes an der Summe der Flächenmaße abhängen.

Mit dieser Vorgehensweise ist nicht nur die Umwandlung zwischen Austenit auf der einen Seite und Ferrit oder Zementit auf der anderen Seite sehr realitätsgetreu beschreibbar, sondern insbesondere auch die Umwandlung von Austenit in Perlit und umgekehrt. Es ist somit das gesamte wesentliche Umwandlungsverhalten von Stahl in festem Zustand korrekt beschreibbar. Ferner ist mit dieser Vorgehensweise ermittelbar, ob Perlit gebildet wird oder nicht.

Der Anteil des der zweiten Phasengrenze zugeordneten Flächenmaßes an der Summe der Flächenmaße kann derart bestimmt werden, dass die Phasengrenzen stets nebeneinander angeordnet bleiben. Alternativ ist es aber auch möglich, diesen Anteil derart nachzuführen, dass die Phasengrenzen aufeinander zu streben. Anhand dieses Anteils kann dann auch abgeleitet werden, ob Austenit nur in die erste weitere Phase, nur in die zweite weitere Phase oder sowohl in die erste als auch in die zweite weitere Phase umgewandelt wird.

Prinzipiell ist es möglich, die Ausbildung der ersten Phasengrenze dreidimensional zu ermitteln. Dies fordert aber einen erheblichen Rechenaufwand. Vorzugsweise wird daher die Rechnung eindimensional vorgenommen. Dies ist einfacher möglich, wenn das Volumenelement ein raumfüllender aristotelescher A_{J}

5

10

20

30

35

Körper, insbesondere ein Quader, ist. Es ist also vorzugsweise so,

- dass das betrachtete Volumenelement quaderförmig ausgebildet ist und drei Grundabmessungen aufweist,
- dass die erste Phasengrenze als Rechteck mit einer ersten Längsseite und einer ersten Querseite ausgebildet ist und
 - dass die erste Längsseite mit einer ersten der Grundabmessungen korrespondiert, die erste Querseite parallel zu einer zweiten der Grundabmessungen verläuft und Verschiebungen der ersten Phasengrenze parallel zu der dritten der Grundabmessungen erfolgen.

Bei Berücksichtigung auch der zweiten weiteren Phase ist es dann so,

- 15 dass die zweite Phasengrenze als Rechteck mit einer zweiten Längsseite und einer zweiten Querseite ausgebildet ist und
 - dass die zweite Längsseite mit der ersten der Grundabmessungen korrespondiert, die zweite Querseite parallel zur zweiten der Grundabmessungen verläuft und Verschiebungen der zweiten Phasengrenze parallel zur dritten der Grundabmessungen erfolgen.

Wenn die Summe der Querseiten der Phasengrenzen ungefähr gleich dem 1,5- bis 3-fachen eines kritischen Lamellenabstandes ist, bei dem eine Energiebilanz, die einerseits mit dem Verschieben der Phasengrenzen korrespondierende Phasenumwandlungen des Stahls und andererseits mit dem Verschieben der Phasengrenzen korrespondierende Änderungen der Fläche einer Grenzschicht zwischen der ersten und der zweiten weiteren Phase berücksichtigt, ausgeglichen ist, kann mittels des Modells auch der Lamellenabstand des Perlits ermittelt werden. Der Lamellenabstand (das heißt die Summe der Querseiten der Phasengrenzen) kann dabei insbesondere in etwa gleich dem Doppelten des kritischen Lamellenabstands sein.

Trotz der nur eindimensionalen Rechnung liefert das erfindungsgemäße Modellierverfahren sehr realitätsgetreue Ergeb-

15

20

30

35

nisse, wenn der Anteil an Austenit anhand einer nicht linearen Funktion der Lage der Phasengrenze bzw. der Phasengrenzen ermittelt wird.

Wenn die Ermittlung, in welchen Konzentrationen das mindestens eine bewegliche Legierungselement beidseits der ersten Phasengrenze bzw. beidseits der ersten und beidseits der zweiten Phasengrenze vorliegt, anhand der Gibbsschen freien Enthalpien der Phasen erfolgt, ist die Ermittlung der Konzentrationen des mindestens einen beweglichen Legierungselements an den Phasengrenzen besonders einfach.

Es ist möglich, stets die gekoppelten Stefan-Probleme zu lösen und daraus abzuleiten, welche Phasen in welchem Umfang gebildet werden. In manchen Fällen ist dies sogar unumgänglich. Manchmal ist es aber möglich, vor dem Lösen der Phasen-umwandlungsgleichung anhand der im Anfangszustand bereits vorhandenen Phasen und anhand der Gibbsschen freien Enthalpien vorab zu ermitteln, ob sowohl Austenit als auch die erste weitere Phase vorliegen bzw. ob zusätzlich zu Austenit und der ersten weiteren Phase auch die zweite weitere Phase vorliegt.

Im Einzelfall kann die Anzahl von Volumenelementen klein sein. Im Extremfall ist sie gleich Eins. In aller Regel umfasst das Stahlvolumen aber eine Vielzahl von Volumenelementen. Wenn das Stefan-Problem bzw. die Stefan-Probleme nur für einen Teil der Volumenelemente gelöst wird bzw. werden und die lokalen Anteile der Phasen der anderen Volumenelemente anhand der lokalen Anteile der Phasen des Teils der Volumenelemente ermittelt werden, kann daher die zum Modellieren des Verhaltens des Stahlvolumens erforderliche Rechenleistung deutlich reduziert werden, ohne die Aussagekraft der Modellrechnung wesentlich zu verschlechtern. Die Wärmeleitungsgleichung hingegen wird in aller Regel individuell für jedes Volumenelement gelöst.

30

35

Das Modellierverfahren kann alternativ online und in Echtzeit oder aber offline ausgeführt werden.

Es ist z. B. möglich,

- 5 dass dem Rechner ein Erstzustand und zumindest eine gewünschte Endgröße vorgegeben werden,
 - dass das obige Modellierverfahren iterativ angewendet wird,
 - dass der Anfangszustand der ersten Iteration dem Erstzustand und der Anfangszustand jeder weiteren Iteration dem unmittelbar zuvor ermittelten Folgezustand entspricht und
 - dass anhand des nach einer letzten Iteration ermittelten Folgezustands eine erwartete Endgröße ermittelt und mit der gewünschten Endgröße verglichen wird.
- In diesem Fall kann das erfindungsgemäße Modellierverfahren alternativ online und in Echtzeit oder offline ausgeführt werden.
- Insbesondere bei einer offline-Ausführung ist es dabei möglich, dass die Einflussgrößen der Iterationen in ihrer Gesamtheit einem Einflussgrößenverlauf entsprechen, der Rechner
 auf Grund des Vergleichs der erwarteten Endgröße mit der gewünschten Endgröße den Einflussgrößenverlauf variiert und
 ausgehend vom Erstzustand das obige Modellierverfahren erneut
 ausführt, bis zumindest die erwartete Endgröße mit der gewünschten Endgröße korrespondiert.

Es ist aber auch möglich, dass der Rechner anhand einer aus dem Anfangszustand ermittelten Anfangsgröße und einer gewünschten Folgegröße die Einflussgröße ermittelt und eine Beeinflussungseinrichtung derart ansteuert, dass das Stahlvolumen entsprechend der ermittelten Einflussgröße beeinflusst wird. In diesem Fall muss das Modellierverfahren online und in Echtzeit ausgeführt werden. Das Ansteuern der Beeinflussungseinrichtung kann dabei alternativ sofort oder in der darauffolgenden Iteration erfolgen.

Weitere Vorteile und Einzelheiten ergeben sich aus der nachfolgenden Beschreibung eines Ausführungsbeispiels in Verbindung mit den Zeichnungen. Dabei zeigen in Prinzipdarstellung

- 5 FIG 1 eine Kühlstrecke für ein Stahlband,
 - FIG 2 das Stahlband von FIG 1 im Detail,
 - FIG 3 ein Volumenelement in perspektivischer Darstellung,
 - FIG 4 ein Ablaufdiagramm,
 - FIG 5 ein weiteres Ablaufdiagramm,
- 10 FIG 6 eine Wärmeleitungsgleichung und eine Phasenumwandlungsgleichung,
 - FIG 7 eine weitere Wärmeleitungsgleichung und eine Phasenumwandlungsgleichung,
 - FIG 8 ein weiteres Ablaufdiagramm,
- 15 FIG 9 die Gibbsschen freien Enthalpien der Phasen des Stahls als Funktion des Kohlenstoffanteils bei einer ersten Temperatur,
 - FIG 10 die Gibbsschen freien Enthalpien als Funktion des Kohlenstoffanteils des Stahls bei einer zweiten Temperatur,
 - FIG 11 ein Volumenelement in perspektivischer Darstellung,
 - FIG 12 das Volumenelement von FIG 11 in der Seitenansicht,
 - FIG 13 ein Volumenelement analog dem von FIG 12,
 - FIG 14 ein Volumenelement in perspektivischer Darstellung,
 - FIG 15 das Volumenelement von FIG 14 in der Draufsicht,
 - FIG 16 das Volumenelement von FIG 15 im Schnitt gemäß der Linie XVI XVI von FIG 15,
 - FIG 17 das Volumenelement von FIG 15 im Schnitt gemäß der Linie XVII XVII von FIG 15,
- 30 FIG 18 ein weiteres Ablaufdiagramm und
 - FIG 19 ein Detail von FIG 15.

Gemäß FIG 1 soll z.B. ein Stahlband 1 gekühlt werden, damit es vorgegebene Endeigenschaften annimmt. Hierzu wird das

35 Stahlband 1 z. B. in einer Kühlstrecke 2 mit einem Kühlmedium 3 - in der Regel Wasser - beaufschlagt.

ben wird.

Das Stahlband 1 weist eine Bandbreite b und eine Banddicke d auf. Es weist ferner eine - prinzipiell beliebige - Bandlänge auf. Es durchläuft die Kühlstrecke 2 mit einer Bandgeschwin-digkeit v.

5

10

30

Die Bandgeschwindigkeit v wird kontinuierlich erfasst und einem Rechner 4 zugeführt, der die Kühlstrecke 2 steuert. Der Rechner 4 ist somit in der Lage, in an sich bekannter Weise eine Wegverfolgung des Stahlbandes 1 zu realisieren. Dem Rechner 4 ist also bekannt, auf welche Bereiche des Stahlbandes 1 eingewirkt wird, wenn das Stahlband 1 mittels Aufbringungseinrichtungen 5 der Kühlstrecke 2 mit dem Kühlmedium 3 beaufschlagt wird.

Der Rechner 4 ist mit einem Computerprogramm 6 programmiert, das dem Rechner 4 über einen Datenträger 7, z. B. eine CD-ROM 7, zugeführt wird. Auf dem Datenträger 7 ist das Computerprogramm 6 in (ausschließlich) maschinenlesbarer Form gespeichert. Das Computerprogramm 6 wird vom Rechner 4 übernommen und in einem Massenspeicher 8, z. B. einer Festplatte 8, des Rechners 4 hinterlegt. Dadurch ist der Rechner 4 in der Lage, bei Aufruf des Computerprogramms 6 ein Modellierverfahren für das Stahlband 1 bzw. für dessen einzelne Bereiche (= das Stahlvolumen 1) auszuführen, das nachfolgend näher beschrie-

Gemäß FIG 2 wird hierzu das Stahlvolumen 1 innerhalb des Rechners 4 in Volumenelemente 9 zerlegt. Soweit ein Volumenelement 9 dabei nicht allseitig von anderen Volumenelementen 9 umgeben ist, sind dem jeweiligen Volumenelement 9 ein oder zwei Flächenelemente 10 zugeordnet. Die Flächenelemente 10 bilden in ihrer Gesamtheit eine Volumenoberfläche des Stahlbandes 1 bzw. des betrachteten Bereichs des Stahlbandes 1.

Der Rechner 4 realisiert auf Grund der Programmierung mit dem Computerprogramm 6 insbesondere ein Modell, in dem für jedes Volumenelement 9 die thermischen Kopplungen mit seiner Umge-

10

bung berücksichtigt sind. Jedes Volumenelement 9 ist dabei - siehe FIG 3 - quaderförmig ausgebildet. Es weist also drei Grundabmessungen A, B, C auf, die in der Regel parallel zur Richtung der Bandgeschwindigkeit v, zur Bandbreite b und zur Banddicke d orientiert sind.

In einer ersten Ausgestaltung des erfindungsgemäßen Modellierverfahrens wird dem Rechner 4 gemäß FIG 4 in einem Schritt S1 ein Erstzustand Z zugeführt. Der Erstzustand Z umfasst für jedes Volumenelement 9 des Stahlbandes 1 zunächst lokale Anteile p1, p2, p3 von modellierten Phasen des Stahls. Die Phasen können insbesondere Ferrit (Anteil p1), Zementit (Anteil p2) und Austenit (Anteil p3) sein.

Der Erstzustand Z umfasst weiterhin für jedes Volumenelement 9 des Stahlbandes 1 eine Größe H, die einen lokalen Energieinhalt des Stahls des Volumenelements 9 beschreibt. Beispielsweise kann diese Größe H die Enthalpie H des Volumenelements 9 sein. Alternativ kommen auch die Temperatur oder
die Entropie in Frage.

Schließlich umfasst der Erstzustand Z für mindestens eines der Volumenelemente 9 des Stahlbandes 1, vorzugsweise für jedes Volumenelement 9 des Stahlbandes 1, noch eine lokale Konzentrationsverteilung K mindestens eines im Stahl beweglichen Legierungselements. Das bewegliche Legierungselement kann insbesondere Kohlenstoff sein. Alternativ oder zusätzlich kommt z. B. auch Stickstoff in Frage.

Dem Rechner 4 wird im Rahmen des Schrittes S1 weiterhin zumindest eine gewünschte Endgröße f'* zugeführt. Gegebenenfalls können dem Rechner 4 im Rahmen des Schrittes S1 auch noch gewünschte Zwischengrößen zugeführt werden, so dass dem Rechner 4 gegebenenfalls sogar ein gewünschter zeitlicher Verlauf der Größe vorgegeben werden kann.

10

30

35

Gemäß FIG 4 wird nun in einem Schritt S2 zunächst ein Einflussgrößenverlauf festgelegt. Der Einflussgrößenverlauf umfasst für eine Vielzahl von zeitlich unmittelbar aufeinanderfolgenden Zeitpunkten jeweils eine Einflussgröße W. Die Einflussgröße W entspricht beispielsweise der auf das Stahlvolumen 1 (also das Stahlband 1 bzw. dessen betrachteten Bereich) aufzubringenden Kühlmittelmenge unter Berücksichtigung anderer Einflüsse auf das Stahlvolumen 1, wie beispielsweise von Transportrollen, der Wärmekonvektion, der Wärmeabstrahlung usw.. Sie umfasst für die Vielzahl von Flächenelementen 10 des Stahlvolumens 1 (siehe FIG 2) jeweils einen lokalen Einflüsse Die lokalen Einflüsse wirken dann über das jeweilige Flächenelement 10 auf das Stahlvolumen 1 ein.

15 Gemäß FIG 4 wird nunmehr in einem Schritt S3 ein Anfangszustand ZA des Stahlvolumens 1 gleich dem Erstzustand Z und eine Zeitbasis t auf einen Anfangszeitpunkt t0 gesetzt. Der Anfangszeitpunkt t0 entspricht dabei in der Regel dem Zeitpunkt, zu dem das betrachtete Stahlvolumen 1, also z. B. ein Abschnitt des Stahlbandes 1, in die Kühlstrecke 2 eintritt.

Sodann wird in einem Schritt S4 anhand des Einflussgrößenverlaufs die zu dem durch die Zeitbasis t bestimmten Zeitpunkt
aufzubringende Einflussgröße W ermittelt. In einem Schritt S5
ermittelt der Rechner 4 dann anhand des momentanen Anfangszustands ZA des Stahlvolumens 1 und der über die Volumenoberfläche auf das Stahlvolumen 1 einwirkenden momentanen Einflussgröße W einen Folgezustand ZF des Stahlvolumens 1. Der
Rechner 4 löst dabei eine Wärmeleitungsgleichung und eine
Phasenumwandlungsgleichung. Der Folgezustand ZF umfasst dieselben Elemente K, p1, p2, p3, H wie der Anfangszustand ZA.

Sodann wird in einem Schritt S6 die Zeitbasis t um eine zeitliche Schrittweite Δt inkrementiert. Als nächstes wird in einem Schritt S7 geprüft, ob die Zeitbasis t einen Endzeitpunkt t1 erreicht hat. Der Endzeitpunkt t1 entspricht dabei

15

20

30

in der Regel dem Zeitpunkt, zu dem das betrachtete Stahlvolumen 1 die Kühlstrecke 2 wieder verlässt.

Wenn der Endzeitpunkt t1 noch nicht erreicht ist, wird in einem Schritt S8 der Anfangszustand ZA gleich dem unmittelbar zuvor ermittelten Folgezustand ZF gesetzt und sodann zum Schritt S4 zurückgesprungen.

Wenn hingegen der Endzeitpunkt t1 erreicht wurde, wird die aus den Schritten S4 bis S8 bestehende Schleife verlassen. Wenn danach keine weiteren Maßnahmen ergriffen werden, wird nur ein sogenannter Prozessbeobachter realisiert. Vorzugsweise aber wird, wie in FIG 4 dargestellt, in einem Schritt S9 anhand des nunmehr ermittelten Folgezustands ZA eine erwartete Endgröße f', z. B. die Temperatur oder die Materialhärte, ermittelt und mit der gewünschten Endgröße f'* verglichen. Wenn die erwartete Endgröße f' mit der gewünschten Endgröße f'* nicht korrespondiert, wird - die entsprechende Rechenleistung vorausgesetzt - in einem Schritt S10 der Verlauf der Einflussgröße W variiert. Sodann wird zum Schritt S3 zurückgesprungen. Anderenfalls ist der erforderliche Kühlmittelmengenverlauf ermittelt, so dass der Rechner 4 nunmehr die Kühlstrecke 2 in einem Schritt S11 entsprechend ansteuern kann.

Der Vollständigkeit halber sei dabei erwähnt, dass der Rechner 4, wenn ihm außer der gewünschten Endgröße f'* auch gewünschte Zwischengrößen vorgegeben werden, selbstverständlich den Kühlmittelmengenverlauf erst bis zu der ersten gewünschten Zwischengröße ermittelt, dann bis zur zweiten gewünschten Zwischengröße usw., bis der gesamte Kühlmittelmengenverlauf bis zur gewünschten Endgröße f'* ermittelt ist.

Gemäß den FIG 1 und 4 wird das obenstehend beschriebene Modellierverfahren online und in Echtzeit ausgeführt. Es ist aber selbstverständlich ohne Weiteres auch eine Offline-Ausführung möglich. Dies ist in FIG 1 dadurch angedeutet, dass

30

35

die Verbindung der Kühlstrecke 2 mit dem Rechner 4 als öffenbare Verbindung angedeutet ist, also nicht unmittelbar eine Ansteuerung der Kühlstrecke 2 erfolgen muss. Weiterhin ist aus diesem Grund der Schritt S11 in FIG 4 nur gestrichelt eingezeichnet.

Die Vorgehensweise gemäß FIG 4 erfordert einen sehr hohen Rechenaufwand. Wenn die zur Ausführung des Verfahrens gemäß FIG 4 erforderliche Rechenleistung nicht zur Verfügung steht, aber dennoch eine Online-Steuerung unter Nutzung des erfindungsgemäßen Modellierverfahrens erfolgen soll, wird online und in Echtzeit ein Verfahren ausgeführt, das nachfolgend in Verbindung mit FIG 5 näher beschrieben wird.

15 Gemäß FIG 5 nimmt der Rechner 4 in einem Schritt S12 analog zum Schritt S1 den Erstzustand Z entgegen. In einem Schritt S13 setzt der Rechner 4 analog zum Schritt S3 den Anfangszustand ZA gleich dem Erstzustand Z und die Zeitbasis t auf den Zeitpunkt t0. Sodann ermittelt der Rechner 4 in einem Schritt S14 eine gewünschte Folgegröße f* oder nimmt sie entgegen.

In einem Schritt S15 ermittelt der Rechner 4 analog zum Schritt S9 anhand des Anfangszustands ZA eine Anfangsgröße f. Anhand der im Schritt S15 ermittelten Anfangsgröße f und der gewünschten Folgegröße f* ermittelt der Rechner 4 dann in einem Schritt S16 die Einflussgröße W. In einem Schritt S17, der mit dem Schritt S11 korrespondiert, steuert der Rechner 4 schließlich die Kühlstrecke 2 entsprechend der ermittelten Einflussgröße W an. Das Ansteuern erfolgt dabei, wie in FIG 5 dargestellt, vorzugsweise sofort. Gegebenenfalls kann aber auch ein Ansteuern im nächsten Zyklus erfolgen.

Die nachfolgenden Schritte S18 bis S21 korrespondieren mit den Schritten S5 bis S8 von FIG 4. Bezüglich dieser Schritte S18 bis S21 wird daher von einer detaillierten Erläuterung abgesehen.

10

30

35

Das Verfahren gemäß FIG 5 wird vorzugsweise z. B. bei einer Regelung eines die Kühlstrecke 2 durchlaufenden Stahlbandes 1 auf einen Verlauf der gewünschten Folgegröße f* eingesetzt. In diesem Fall muss das obenstehend in Verbindung mit FIG 5 beschriebene Verfahren selbstverständlich individuell für jeden einzelnen Abschnitt des Stahlbandes 1 ausgeführt werden. Auch muss für jeden Abschnitt jeweils diejenige der Aufbringungseinrichtungen 5 angesteuert werden, in deren Einflussbereich sich der betrachtete Abschnitt gerade befindet. Dies wird durch die eingangs erwähnte Wegverfolgung gewährleistet. Das Verfahren gemäß FIG 5 wird in diesem Fall ferner parallel für alle in der Kühlstrecke 2 befindlichen Abschnitte des Stahlbandes 1 ausgeführt.

Die jeweils gewünschte Folgegröße f* kann dem Rechner 4 explizit vorgegeben werden. Es ist aber auch möglich, dass dem Rechner 4 lediglich die gewünschte Folgegröße f* z. B. beim Austritt des Stahlbandes 1 aus der Kühlstrecke 2 oder beim Erreichen eines Haspels, auf den das Stahlband 1 aufgehaspelt wird, vorgegeben wird. In diesem Fall ermittelt der Rechner 4 selbsttätig anhand einer vorbestimmten Ermittlungsvorschrift die gewünschten Folgegrößen f* für die einzelnen Iterationen.

Die Regelung gemäß FIG 5 kann selbstverständlich auch anderweitig strukturiert werden, z. B. so, wie sie in der älteren DE 103 21 792.4 beschrieben ist.

Wie erwähnt, werden in den Schritten S5 und S18 eine Wärmeleitungsgleichung und eine Phasenumwandlungsgleichung gelöst.

Ein Beispiel einer Wärmeleitungsgleichung und einer Phasenumwandlungsgleichung sind in FIG 6 dargestellt. Dort ist ein dreidimensionaler Ansatz für die Wärmeleitung getroffen. Bei Bändern kann dieser Ansatz in aller Regel aber auf den eindimensionalen Ansatz gemäß FIG 7 vereinfacht werden, da der Wärmefluss in Bandlängsrichtung und Bandquerrichtung in der

35

Regel vernachlässigbar ist. $\partial/\partial x$ ist dabei die Ortsableitung in Banddickenrichtung.

Ersichtlich sind die Wärmeleitungsgleichung und die Phasenumwandlungsgleichung miteinander gekoppelt. Zur Lösung der Wärmeleitungsgleichung und der Phasenumwandlungsgleichung (= Schritt S5, S18) wird daher gemäß FIG 8 wie folgt vorgegangen:

In einem Schritt S22 wird zunächst die lokale Temperatur T
ermittelt. Die Ermittlung erfolgt anhand der Enthalpie H und
der Anteile p1, p2, p3 der Phasen Ferrit, Zementit und Austenit. Auf Grund der geringen Größe des betrachteten Volumenelements 9 kann nämlich angenommen werden, dass die lokale
Temperatur T innerhalb des Volumenelements 9 konstant ist.
Damit weisen auch die Phasen des Stahls innerhalb dieses Volumenelements 9 dieselbe lokale Temperatur T auf. Die Enthalpie H des Volumenelements 9 lässt sich somit als

$$H = p1H1(T) + p2H2(T) + p3H3(T)$$
 (1)

schreiben. Da ferner für jede der Phasen die Enthalpien H1, H2 bzw. H3 der jeweiligen Phase als Funktion der lokalen Temperatur T - gegebenenfalls bei Austenit unter Berücksichtigung des Kohlenstoffanteils - eineindeutig bestimmt sind, lässt sich durch die Gleichung 1 die lokale Temperatur T ohne Weiteres ermitteln.

Für die im Schritt S22 ermittelte lokale Temperatur T werden dann in einem Schritt S23 – getrennt für die Phasen Ferrit, Zementit und Austenit – die Gibbsschen freien Enthalpien G1 bis G3 der einzelnen Phasen als Funktion des Anteils des beweglichen Legierungselements ermittelt. Beispiele derartiger Verläufe sind in den FIG 9 und 10 dargestellt. Bei dem Beispiel gemäß FIG 9 liegt die lokale Temperatur T dabei oberhalb der Umwandlungstemperatur von Austenit in Perlit, bei dem Beispiel gemäß FIG 10 darunter.

10

15

20

Es ist möglich, stets anzunehmen, dass alle drei Phasen Ferrit, Zementit und Austenit vorliegen und erst später – siehe die nachfolgenden Erläuterungen zu FIG 18 – zu entscheiden, welche Phasen vorliegen und welche Phasenumwandlungen erfolgen. Gemäß FIG 8 wird aber zunächst in einem Schritt S24 die Anzahl der zu betrachtenden Phasen ermittelt. Dies geschieht wie folgt:

Zunächst wird das System Ferrit-Austenit heraus gegriffen. Für dieses System wird überprüft, ob es bei dem im Volumen-element 9 vorhandenen Gesamtanteil des beweglichen Legierungselements rein ferritisch, rein austenitisch oder gemischt stabil ist und welche Phasenverteilung gegebenenfalls im stabilen Zustand vorliegt. Der Gesamtanteil des beweglichen Legierungselements kann anhand der Konzentrationsverteilung ohne Weiteres ermittelt werden.

Die Ermittlung der stabilen Phase(n) und gegebenenfalls der Phasenverteilung geschieht dadurch, dass versucht wird, ein Minimum für die gesamte Gibbssche freie Enthalpie G eines derartigen Systems zu ermitteln. Die konkrete Vorgehensweise ergibt sich dabei so, wie sie in den Seiten 16 bis 18 der älteren deutschen Patentanmeldung 102 51 716.9 beschrieben ist. Diese Vorgehensweise liefert zugleich auch Konzentrationen kl und k3, in denen das bewegliche Legierungselement – typischerweise Kohlenstoff – an einer etwaigen Phasengrenze 11 zwischen Ferrit und Austenit im ferritischen bzw. im austenitischen Bereich gegebenenfalls vorliegt.

In analoger Weise werden sodann die Mischungssysteme FerritZementit (= Perlit) und Austenit-Zementit untersucht. Die Untersuchung des Mischungssystems Austenit-Zementit liefert dabei zugleich auch Konzentrationen k2 und k4, in denen das bewegliche Legierungselement an einer etwaigen Phasengrenze 12
zwischen Zementit und Austenit im zementitischen bzw. im
austenitischen Bereich gegebenenfalls vorliegt.

Die drei für die drei Zweiphasen-Systeme ermittelten minimalen Gibbsschen freien Enthalpien G werden miteinander verglichen und das Zweiphasen-System mit der insgesamt minimalen Gibbsschen freien Enthalpie G herausgegriffen. Wenn dieses Zweiphasen-System Austenit enthält, lässt sich anhand der Gibbsschen freien Enthalpien ermitteln, ob der stabile Zustand eine oder zwei Phasen umfasst, welche Phase dies gegebenenfalls ist bzw. welche Phasen dies gegebenenfalls sind und welche Konzentrationen k1, k3 bzw. k2, k4 des beweglichen Legierungselements beidseits der Phasengrenze 11 von Austenit zu Ferrit bzw. der Phasengrenze 12 von Austenit zu Zementit jeweils vorliegen.

Aus dem Anfangszustand ZA ist ferner bekannt, welche Phasen anfänglich zu welchen Anteilen p1 bis p3 vorliegen.

Wenn das Zweiphasen-System mit der minimalen Gibbsschen freien Enthalpie G Austenit enthält, lässt sich also durch eine Zusammenschau der anfänglich vorliegenden Phasen und der als stabil ermittelten Phasen ermitteln, ob ein Reinsystem mit nur einer der Phasen Ferrit, Austenit und Zementit oder ein Mischsystem mit zwei oder sogar drei der Phasen Ferrit, Austenit und Zementit betrachtet werden muss. Auf Grund des Umstands, dass anhand der Gibbsschen freien Enthalpien G, G1 bis G3 auch ermittelbar ist, welche Phase stabil ist bzw. welche Phasen stabil sind, ist darüber hinaus auch die Richtung einer etwaigen Phasenumwandlung bereits bekannt.

Wenn das Zweiphasen-System mit der insgesamt minimalen Gibbsschen freien Enthalpie G das Perlitsystem ist und der Anfangszustand ZA kein Austenit enthält (p3 = 0), liegt ein vollständig umgewandeltes Gefüge, also ein Zweiphasen-System Ferrit-Zementit vor, das keiner Phasenumwandlung mehr unterliegt. Wenn hingegen der Anfangszustand ZA Austenit enthält (p3 > 0) und das Perlitsystem die minimale Gibbssche freie Enthalpie G aufweist, lässt sich nicht ohne Weiteres entscheiden, ob nun eine oder beide der Phasen Ferrit und Zemen-

30

35

tit gebildet werden. In diesem Fall wird daher vorläufig angenommen, dass beide Phasen gebildet werden, also ein Dreiphasensystem Ferrit-Zementit-Austenit zu betrachten ist.

In einem Schritt S25 wird als nächstes geprüft, ob in dem be-5 trachteten Volumenelement 9 mehr als eine Phase vorliegt. Wenn dies nicht der Fall ist, erfolgt selbstverständlich keine Phasenumwandlung. Dennoch wird in einem Schritt S26 für dieses Volumenelement 9 eine Diffusionsgleichung für das bewegliche Legierungselement angesetzt und gelöst, um etwaige 10 Konzentrationsschwankungen des beweglichen Legierungselements innerhalb des betrachteten Volumenelements 9 auszugleichen. Diese Vorgehensweise ist insbesondere bei Austenit, bei dem der Gehalt an Kohlenstoff stark schwanken kann, von Bedeutung. Der Ansatz und die Lösung einer derartigen Diffusions-15 gleichung ist Fachleuten allgemein bekannt. Auf den Ansatz der Diffusionsgleichung und deren Lösung wird daher nachstehend nicht näher eingegangen.

Wenn in dem betrachteten Volumenelement 9 mehr als eine Phase vorliegt, wird als nächstes in einem Schritt S27 abgeprüft, ob alle drei Phasen vorliegen. Wenn dies nicht der Fall ist, liegt ein Zweiphasen-System vor. In diesem Fall wird in einem Schritt S28 überprüft, ob eine der beiden vorliegenden Phasen Austenit ist. Wenn dies nicht der Fall ist, liegt ein vollständiges Perlit-System vor, also eine Schichtstruktur aus Ferrit und Zementit. Diese Struktur ist im Wesentlichen stabil. In diesem Fall müssen daher keine weiteren Maßnahmen ergriffen werden.

Wenn hingegen eine der Phasen Austenit ist und somit die andere Phase Ferrit oder Zementit, existiert eine Phasengrenze 11 zwischen Austenit und Ferrit (siehe FIG 11 und 12) oder eine Phasengrenze 12 zwischen Austenit und Zementit (siehe FIG 11 und 13). In diesem Fall wird als vereinfachende Maßnahme angenommen, dass die Phasengrenze 11 bzw. 12 als Rechteck ausgebildet ist, das eine Längsseite und eine Querseite

10

15

20

aufweist. Die Längsseite und die Querseite des Rechtecks korrespondieren dabei mit den Grundabmessungen A und B des betrachteten Volumenelements 9. Verschiebungen der Phasengrenze
11, 12 erfolgen in diesem Fall, wie insbesondere aus FIG 11
ersichtlich ist, parallel zur Grundabmessung C.

Wie Fachleuten allgemein bekannt ist und auch aus FIG 12 ersichtlich ist, ist in Ferrit nur sehr wenig Kohlenstoff enthalten. An der Phasengrenze 11 zum austenitischen Bereich hingegen erfolgt ein Konzentrationssprung. Die Konzentrationen k1, k3, in denen das bewegliche Legierungselement an der Phasengrenze 11 vorliegt, sind dabei die Konzentrationen k1, k3, die obenstehend im Schritt S24 für das Ferrit-Austenit-System ermittelt wurden.

Wenn, wie in FIG 12 dargestellt, eine Umwandlung von Austenit in Ferrit erfolgen soll, muss der "Konzentrationsberg" des beweglichen Legierungselements im austenitischen Bereich in der Nähe der Phasengrenze 11 abdiffundieren. Umgekehrt muss, wenn eine Umwandlung von Ferrit in Austenit erfolgen soll, das "Konzentrationstal" des beweglichen Legierungselements im austenitischen Bereich in der Nähe der Phasengrenze 11 ständig aufgefüllt werden. Die numerische oder analytische Lösung dieser Aufgabe ist allgemein als Stefan-Problem bekannt. Sie erfolgt in einem Schritt S29. Das Stefan-Problem lässt sich im vorliegenden Fall wie folgt formulieren:

$$K'_{t} - DK'_{xx} = 0 \tag{2}$$

30 Dist dabei die - gegebenenfalls temperaturabhängige - Diffusionskonstante des beweglichen Legierungselements im Austenit. K' ist die Konzentration K. Die Indizes t und x bedeuten die Ableitung nach der Zeit bzw. dem Ort in Verschieberichtung der Phasengrenze 11. Die Verschieberichtung der Phasengrenze 11 muss dabei nicht notwendigerweise die Banddickenrichtung sein.

Für die Gleichung 2 sind die Anfangsbedingungen durch die örtliche Konzentrationsverteilung K' des beweglichen Legierungselements im Anfangszustand ZA definiert. Beim Lösen des Stefan-Problems müssen dann nur noch die Randbedingungen betrachtet werden, dass im ferristischen bzw. im austenitischen Bereich an der Phasengrenze 11 die Konzentrationen k1 bzw. k3 vorliegen, dass das bewegliche Legierungselement das betreffende Volumenelement 9 nicht verlassen kann und dass sich die Verschiebung δx ' der Phasengrenze 11 gemäß der Stefan-Bedingung zu

$$(k3 - k1)\delta x'/\delta t = -DK'_{x} \tag{3}$$

ergibt, wobei δ t die beim Lösen des Stefan-Problems benutzte zeitliche Schrittweite ist. Diese kann dabei ein Bruchteil (1/2, 1/3, 1/4 ...) der zeitlichen Schrittweite Δ t oder aber gleich der zeitlichen Schrittweite Δ t sein.

Durch Lösen des Stefan-Problems im Schritt S29 wird also ermittelt, ob und wie sich die Konzentrationsverteilung K bzw. K' des beweglichen Legierungselements im austenitischen Bereich des betrachteten Volumenelements 9 ändert. Zugleich wird dabei auch ermittelt, ob und um welches Ausmaß δx ' sich die Phasengrenze 11 dadurch verschiebt.

Falls die weitere Phase nicht Ferrit, sondern Zementit ist, ergibt sich ein prinzipiell gleich gearteter Lösungsansatz und auch eine prinzipiell gleich geartete Lösung. Der Unterschied ist nur, dass bei der Bildung von Zementit im Zementit Kohlenstoff stark angereichert ist und im austenitischen Bereich in der Nähe der Phasengrenze 12 zum Zementit Kohlenstoff verarmt ist. Auch dies ist Fachleuten allgemein bekannt und in FIG 13 dargestellt. Es ändern sich also die Randbedingungen. Die Verschiebung δx " der Phasengrenze 11 gemäß der Stefan-Bedingung ergibt sich in diesem Fall zu

$$(k4 - k2)\delta x'' / \delta t = -DK''_{\mathcal{X}} \tag{4}$$

10

30

K" ist dabei wieder die Konzentration K.

Wenn hingegen im Schritt S28 festgestellt wurde, dass alle drei Phasen vorliegen bzw. vorliegen könnten, ergibt sich ein komplizierteres Problem. Denn dann muss der Ansatz gewählt werden, dass eine Schichtstruktur existiert, die – siehe FIG 14 und 15 – abwechselnd aus einer Ferritschicht 13 und einer Zementitschicht 14 besteht. Die Schichtstruktur grenzt an einen austenitischen Bereich 15 an. Die FIG 16 und 17 zeigen jeweils einen Verlauf der Konzentration K' bzw. K" des beweglichen Legierungselements in einer Ferritschicht 13 bzw. einer Zementitschicht 14 und im austenitischen Bereich 15 vor diesen Schichten 13, 14.

Im Rahmen des Modells wird dabei nach wie vor angenommen, dass die Phasengrenzen 11, 12 als Rechtecke ausgebildet sind, die jeweils eine Längsseite und eine Querseite aufweisen. Die Längsseiten korrespondieren weiterhin mit der ersten Grundabmessung A. Die Querseiten verlaufen nach wie vor parallel zur zweiten Grundabmessung B. Auch wird nach wie vor angenommen, dass Verschiebungen der Phasengrenzen 11, 12 parallel zur dritten Grundabmessung C erfolgen.

Für jede der Phasengrenzen 11 und 12 wird nunmehr in einem Schritt S30 ein Stefan-Problem angesetzt und gelöst. Der Schritt S30 ist in FIG 18 detaillierter dargestellt.

Das Stefan-Problem für die Phasengrenze 11 zwischen Ferrit und Austenit gehorcht gemäß FIG 18, siehe dort Schritt S31, folgender Gesetzmäßigkeit:

$$K'_{t} - DK'_{xx} = L1 \tag{5}$$

K' ist dabei die Konzentration des beweglichen Legierungsele-35 ments vor der Phasengrenze 11.

15

20

30

Das Stefan-Problem für die Phasengrenze 12 zwischen Zementit und Austenit gehorcht folgender Gesetzmäßigkeit:

$$K''_{t}-DK''_{xx}=L2 \tag{6}$$

K" ist dabei - analog zu K' - die Konzentration des beweglichen Legierungselements vor der Phasengrenze 12.

L1 und L2 sind Kopplungsterme. Sie sind - siehe FIG 14
10 Funktionen eines Lamellenabstands l der Schichtstruktur und

eines Anteils q der Zementitphase an der Schichtstruktur so
wie dessen zeitlicher Ableitung. Ausgeschrieben können sie z.

B. lauten:

$$L1 = \frac{1}{q^2 - q - 1} \left(\frac{48qD}{l^2} - q_t (1 - q)(3q + 1) \right) \quad \text{und}$$
 (7)

$$L2 = \frac{1}{q^2 - q - 1} \left(\frac{48(1 - q)D}{l^2} - q_t q(3q - 4) \right)$$
 (8)

Wie aus den Gleichungen 5 bis 8 ersichtlich ist, sind die beiden Stefan-Probleme auf Grund der Kopplungsterme L1, L2 auf der rechten Seite der Gleichungen 5 und 6 miteinander gekoppelt.

Auch in den Gleichungen 5 bis 8 stehen die Indizes t und x 25 wieder für die Ableitung nach der Zeit bzw. dem Ort in Verschieberichtung der Phasengrenze 11 bzw. 12.

Für die Verschiebungen $\delta x'$, $\delta x''$ der Phasengrenzen 11, 12 gelten weiterhin die Stefan-Bedingungen (siehe Gleichungen 3 und 4). Es ist daher möglich, die Verschiebungen $\delta x'$, $\delta x''$ gemäß den Gleichungen 3 und 4 in einem Schritt S32 gleichzusetzen. Dann ist der Anteil q derart zu bestimmen, dass die Verschiebung $\delta x'$ der Phasengrenze 11 gemäß Gleichung 3 und die Verschiebung $\delta x''$ der Phasengrenze 12 gemäß Gleichung 4 denselben

20

30

Wert annehmen. Der Anteil q ist in diesem Fall also derart zu bestimmen, dass die Phasengrenzen 11, 12 stets nebeneinander angeordnet bleiben.

Die Gleichheit der Verschiebungen $\delta x'$, $\delta x''$ der Phasengrenzen 11, 12 kann also dadurch erreicht werden, dass der Anteil q der Zementitphase an der Schichtstruktur des Perlit geeignet gewählt wird. Man kann also – z. B. durch Einsetzen und Ausrechnen (trial and error) – ermitteln, bei welchem Anteil q der Zementitphase die Verschiebungen $\delta x'$, $\delta x''$ der Phasengrenzen 11, 12 übereinstimmen.

Anhand des so ermittelten Anteils q lässt sich dann auch bestimmen, ob tatsächlich Perlit gebildet wird oder ob nur eine der beiden Phasen Ferrit und Zementit gebildet wird. Denn nur wenn der Anteil q zwischen Null und Eins liegt, wird Perlit gebildet. Ist der Anteil q hingegen größer als Eins, wird ausschließlich Zementit gebildet. Ist er umgekehrt kleiner als Null, wird ausschließlich Ferrit gebildet.

Der Anteil q kann bei dieser Vorgehensweise aus numerischen Gründen beliebige Werte annehmen, also insbesondere auch kleiner als Null oder größer als Eins sein. Diese Werte sind aber physikalisch sinnlos. Der Anteil q wird daher in Schritten S33 bis S36 gegebenenfalls entsprechend korrigiert.

Die Vorgehensweise gemäß Schritt 32 kann zu numerischen Problemen führen. Alternativ ist es daher möglich, unterschiedliche Verschiebungen $\delta x'$, $\delta x''$ zuzulassen. In diesem Fall wird der Anteil q des Zementit an der Schichtstruktur gemäß

$$q_t = \alpha \frac{\delta x'' - \delta x'}{l \delta t} \tag{9}$$

in Schritten S32a und S32b derart nachgeführt, dass die Lagen 35 der Phasengrenzen 11, 12 aufeinander zustreben. Die Schritte S32a und S32b werden dabei gemäß FIG 18 anstelle des Schrittes S32 ausgeführt. α ist eine geeignete Proportionalitätskonstante. Ihr Wert ist größer als Null.

In diesem Fall wird eine mittlere Verschiebung δ x der Phasen- 5 grenzen 11, 12 zu

$$\delta x = (1 - q)\delta x' + q\delta x'' \tag{10}$$

definiert.

20

Unabhängig davon, welche dieser beiden Vorgehensweisen (Schritt S32 oder Schritte S32a, S32b) ergriffen wird, wird aber in beiden Fällen erst durch die Bestimmung des Anteils quermittelt und abgeleitet, welche Phasen in welchem Umfang gebildet werden.

Wenn Perlit gebildet wird, der Anteil q also zwischen Null und Eins liegt, muss noch der Lamellenabstand 1 bestimmt werden. Dies geschieht gemäß FIG 19 wie folgt:

Mit der Verschiebung δx der Phasengrenzen 11, 12 und dem Anteil q ist bekannt, welche Phasenumwandlungen erfolgen und in welchen Anteilen sie erfolgen. Die Phasenumwandlungen liefern einen Beitrag $\delta E1$ zur Energiebilanz. Der Beitrag $\delta E1$ ist von dem Volumen abhängig, in dem die Phasenumwandlungen erfolgen. Es gilt also

$$\delta E1 = \beta A 1 \delta x \tag{11}$$

 β ist dabei eine vorab ermittelbare Proportionalitätskonstante.

Es ergibt sich ferner eine Änderung der Fläche einer Grenzschicht 16 zwischen Ferrit und Zementit. Auch die Änderung dieser Fläche liefert einen Beitrag δ E2 zur Energiebilanz. Dieser Beitrag δ E2 ist proportional zur Änderung der Fläche der Grenzschicht 16. Es gilt also

20

30

35

$$\delta E 2 = 2\gamma A \delta x \tag{12}$$

γ ist dabei wieder eine vorab ermittelbare Proportionalitätskonstante. Der Faktor 2 ergibt sich dadurch, dass pro Phasengrenze 11, 12 bzw. pro Schicht 13, 14 je eine Grenzschicht 16 vorhanden ist und zwei Phasengrenzen 11, 12 bzw. zwei Schichten 13, 14 betrachtet werden.

Anhand der Gleichungen 11 und 12 lässt sich somit ein kritischer Lamellenabstand l'ermitteln, bei dem die Energiebilanz, welche die beiden Beiträge δ E1 und δ E2 berücksichtigt, ausgeglichen ist. Für diesen kritischen Lamellenabstand l'gilt

$$1' = 2\gamma/\beta . \tag{13}$$

Der Lamellenabstand 1, also die Summe der Schichtdicken 11 und 12, wird nun auf das ca. eineinhalb- bis dreifache dieses kritischen Lamellenabstand 1' gesetzt, z. B. auf das ca. zweifache. Die Schichtdicken 11 bzw. 12 ergeben sich dann zu

$$l1 = (1-q)l \qquad \text{und} \tag{14}$$

$$l2 = ql \tag{15}$$

Die Schichtdicken 11, 12 sind proportional zu Flächenmaßen F1, F2, welche die Phasengrenzen 11, 12 aufweisen. Je eines der Flächenmaße F1, F2 ist in FIG 14 durch Schraffieren entsprechend hervorgehoben.

Wenn in einem der Schritte S29, S30 eine Verschiebung $\delta x'$, $\delta x''$ einer Phasengrenze 11, 12, ermittelt wurde, hat sich somit die Lage der Phasengrenze 11, 12 geändert. In diesem Fall wird in einem Schritt S37 (selbstverständlich unter Beachtung des Vorzeichens der mittleren Verschiebung δx) eine neue Lage der Phasengrenzen 11, 12 oder 11 und 12 bestimmt. In einem Schritt S38 wird dann anhand einer nicht linearen Funktion

30

35

der Lage der Phasengrenze 11, 12 bzw. der Phasengrenzen 11, 12 der Anteil p3 des Austenits ermittelt. Die nicht lineare Funktion berücksichtigt dabei insbesondere den Umstand, dass das Stefan-Problem des Schrittes S29 bzw. die Stefan-Probleme des Schrittes S30 eindimensional angesetzt und gelöst wurden, in der Realität aber eine dreidimensionale Umwandlung erfolgt.

- In einem Schritt S39 werden sodann die Änderungen der Anteile p1, p2 der beiden anderen Phasen Ferrit und Zementit bestimmt. Falls dabei die Schritte S37 bis S39 vom Schritt S29 aus erreicht werden, ist selbstverständlich der Anteil q Null oder Eins.
- Mit der mittleren Verschiebung δx der Phasengrenzen 11, 12 und dem Anteil q des Zementit an der Schichtstruktur (0 < q < 1) lässt sich also auf einfache Weise ermitteln, welche Änderungen sich für die Anteile p1, p2, p3 der Phasen des Stahls bezüglich des betrachteten Volumenelements 9 ergeben.

Trotz der vereinfachenden Annahmen des obigen Modellierverfahrens ergibt sich ein erheblicher Rechenaufwand. Daher werden gemäß FIG 8 vor dem Schritt S22 Schritte S40 und S41 und nach dem Schritt S39 ein Schritt S42 eingefügt.

Im Schritt S40 werden die Volumenelemente 9 zu Gruppen zusammen gefasst. Beispielsweise kann eine Zusammenfassung mehrerer Volumenelemente 9 erfolgen, die in Richtung der Bandbreite b, der Banddicke d und/oder der Bandgeschwindigkeit v aneinander angrenzen. Auch Kombinationen hiervon sind möglich. Im Schritt S41 wird dann pro Gruppe von Volumenelementen 9 je ein einziges der Volumenelemente 9 ausgewählt. Nur für die ausgewählten der Volumenelemente 9 werden in den Schritten S22 bis S39 die Differentialgleichung, das Stefan-Problem bzw. die Stefan-Probleme gelöst und die Anteile p1 p2, p3 der Phasen rechnerisch ermittelt.

Gemäß FIG 8 wird bei jeder Gruppe das Lösungsergebnis des betrachteten Volumenelements 9 im Schritt S42 für die anderen Volumenelemente 9 der jeweiligen Gruppe übernommen. Dies stellt die einfachste Vorgehensweise dar. Es wäre aber auch denkbar, die Anteile p1, p2, p3 der Phasen von Volumenelementen 9, deren Phasenverteilung nicht explizit berechnet worden ist, durch lineare oder nicht lineare Interpolation zu ermitteln.

Auf Grund dieses Umstands, nämlich dass bei jeder Gruppe von Volumenelementen 9 nur die Konzentrationsverteilung K eines der Volumenelemente 9 errechnet wird und für das Lösen der Wärmeleitungsgleichung nicht die Konzentrationsverteilung K, sondern nur die Anteile p1, p2, p3 der vorhandenen Phasen benötigt werden, kann gegebenenfalls auch die Konzentrationsverteilung K nur für dieses eine Volumenelement 9 jeder Gruppe vorgegeben werden.

Die Wärmeleitungsgleichung hingegen wird in einem Schritt S43 individuell für jedes der Volumenelemente 9 gelöst. Der Schritt S43 kann dabei alternativ vor oder nach dem Lösen der Phasenumwandlungsgleichung in den Schritten S22 bis S42 ausgeführt werden.

Das Lösen der Wärmeleitungsgleichung ist ohne Weiteres möglich. Denn die Temperaturen T der einzelnen Volumenelemente 9 sind – siehe obige Erläuterungen zum Schritt S22 – ohne Weiteres ermittelbar, so dass auch deren Ortsgradient sofort ermittelbar ist. Da auch die Anteile p1, p2, p3 der Phasen der einzelnen Volumenelemente 9 ebenfalls bekannt sind, lässt sich auch die Wärmeleitfähigkeit λ der einzelnen Volumenelemente 9 ohne Weiteres ermitteln. Da schließlich die Dichte ρ im Wesentlichen eine Konstante ist und die Enthalpie H der einzelnen Volumenelemente 9 direkt gegeben ist, ist somit auch die Wärmeleitungsgleichung als Ganzes lösbar.

Mittels der vorliegenden Erfindung wird also ein physikalischen Modell erstellt, bei dem auf Basis der Gibbsschen freien Enthalpie G und des Diffusionsgesetzes (Stefan-Problem) das Umwandlungsgeschehen hinsichtlich entstehender Phasenanteile p1, p2, p3 und Umwandlungsgeschwindigkeit mit sehr hoher Genauigkeit beschreibbar ist. Es werden allgemein gültige Ergebnisse ermöglicht, welche auch die Behandlung noch unbekannter Materialien und Werkstoffe erlauben. Die Ansätze sind darüber hinaus nicht nur zur Temperaturberechnung, sondern auch zur Berechnung von Gefügestruktur und Korngröße anwendbar.

Das erfindungsgemäße Modellierverfahren kann an beliebiger Stelle eingesetzt werden, also insbesondere beispielsweise auch bei Kühlvorgängen zwischen Walzgerüsten einer Walzstraße oder bei sogenanntem ferritischem Walzen. Es eignet sich auch zur Beschreibung der Rückumwandlung beim Aufheizen des Stahles.

20

Patentansprüche

- 1. Rechnergestütztes Modellierverfahren für das Verhalten eines Stahlvolumens (1) mit einer Volumenoberfläche,
- 5 wobei ein Rechner (4) anhand eines momentanen Anfangszustands (ZA) des Stahlvolumens (1) und mindestens einer über die Volumenoberfläche auf das Stahlvolumen (1) einwirkenden momentanen Einflussgröße (W) durch Lösen einer Wärmeleitungsgleichung und einer Phasenumwandlungsgleichung einen Folgezustand (ZF) des Stahlvolumens (1) ermittelt,
 - wobei die mindestens eine Einflussgröße (W) für eine Anzahl von Flächenelementen (10) der Volumenoberfläche jeweils einen lokalen Einfluss umfasst und die lokalen Einflüsse über das jeweilige Flächenelement (10) auf das Stahlvolumen (1) einwirken,
 - wobei der Anfangszustand (ZA) und der Folgezustand (ZF) für eine Anzahl von Volumenelementen (9) des Stahlvolumens (1) jeweils lokale Anteile (p1, p2, p3) von modellierten Phasen des Stahls und eine einen lokalen Energieinhalt des Stahls beschreibende Größe (H) umfassen,
 - wobei die modellierten Phasen des Stahls Austenit und eine erste weitere Phase umfassen, in die Austenit umwandelbar ist und die in Austenit umwandelbar ist,
 - dadurch gekennzeichnet,
 - dass der Anfangszustand (ZA) und der Folgezustand (ZF) für mindestens eines der Volumenelemente (9) auch eine lokale Konzentrationsverteilung (K) mindestens eines im Stahl beweglichen Legierungselements umfassen,
 - dass im Rahmen der Umwandlungsgleichung für das mindestens eine Volumenelement (9) ermittelt wird, welche Konzentrationen (k1, k3; k2, k4) des mindestens einen beweglichen Legierungselements beidseits einer ersten Phasengrenze (11, 12) zwischen Austenit und der ersten weiteren Phase vorliegen,
 - 35 dass durch Lösen eines ersten Stefan-Problems ermittelt wird, ob und wie sich die Konzentrationsverteilung (K) des mindestens einen beweglichen Legierungselements im austeni-

35

tischen Bereich des betrachteten Volumenelements (9) ändert und ob und um welches Ausmaß (δx , $\delta x'$, $\delta x''$) sich die erste Phasengrenze (11, 12) dadurch verschiebt, und

- dass die lokalen Anteile (p1, p2, p3) der Phasen anhand einer durch das Ausmaß (δx) der Verschiebung der ersten Phasengrenze (11, 12) bestimmten Lage der ersten Phasengrenze (11, 12) ermittelt werden.
 - 2. Modellierverfahren nach Anspruch 1,
- 10 dadurch gekennzeichnet,
 - dass die modellierten Phasen des Stahls auch eine zweite weitere Phase umfassen, in die Austenit umwandelbar ist und die in Austenit umwandelbar ist,
- dass für das betrachtete Volumenelement (9) im Rahmen der

 Umwandlungsgleichung auch ermittelt wird, welche Konzentrationen (k2, k4; k1, k3) des mindestens einen beweglichen
 Legierungselements beidseits einer zweiten Phasengrenze
 (12, 11) zwischen Austenit und der zweiten weiteren Phase
 vorliegen,
- dass durch zusätzliches Lösen eines zweiten Stefan-Problems ermittelt wird, ob und wie sich die Konzentrationsverteilung (K) des mindestens einen beweglichen Legierungselements im austenitischen Bereich des betrachteten Volumenelements (9) ändert und ob und um welches Ausmaß ($\delta x''$, $\delta x'$) sich die zweite Phasengrenze (12, 11) dadurch verschiebt,
 - dass die Stefan-Probleme miteinander gekoppelt sind,
 - dass den Phasengrenzen (11, 12) Flächenmaße (F1, F2) zugeordnet sind,
- dass ein Anteil (q) des der zweiten Phasengrenze (12) zuge-30 ordneten Flächenmaßes (F2) an der Summe der Flächenmaße (F1, F2) bestimmt wird und
 - dass die lokalen Anteile (p1, p2, p3) auch vom Anteil (q) des der zweiten Phasengrenze (12) zügeordneten Flächenmaßes (F2) an der Summe der Flächenmaße (F1, F2) abhängen.
 - 3. Modellierverfahren nach Anspruch 2, dass der Anda durch gekennzeichnet, dass der An-

teil (q) des der zweiten Phasengrenze (12) zugeordneten Flächenmaßes (F2) an der Summe der Flächenmaße (F1, F2) derart bestimmt wird, dass die Phasengrenzen (11, 12) stets nebeneinander angeordnet bleiben.

5

10

4. Modellierverfahren nach Anspruch 2, dadurch gekennzeichnet, dass der Anteil (q) des der zweiten Phasengrenze (12) zugeordneten Flächenmaßes (F2) an der Summe der Flächenmaße (F1, F2) derart nachgeführt wird, dass die Phasengrenzen (11, 12) aufeinander zu streben.

5. Modellierverfahren nach Anspruch 2, 3, oder 4, dadurch gekennzeichnet, dass anhand

des Anteils (q) des der zweiten Phasengrenze (12) zugeordneten Flächenmaßes (F2) an der Summe der Flächenmaße (F1, F2) abgeleitet wird, ob Austenit nur in die erste weitere Phase, nur in die zweite weitere Phase oder sowohl in die erste als auch in die zweite weitere Phase umgewandelt wird.

20

15

- 6. Modellierverfahren nach einem der obigen Ansprüche, dadurch gekennzeichnet,
- dass das betrachtete Volumenelement (9) quaderförmig ausgebildet ist und drei Grundabmessungen (A, B, C) aufweist,
- dass die erste Phasengrenze (11, 12) als Rechteck mit einer ersten Längsseite und einer ersten Querseite ausgebildet ist und
- dass die erste Längsseite mit einer ersten der Grundabmessungen (A, B, C) korrespondiert, die erste Querseite parallel zu einer zweiten der Grundabmessungen (A, B, C) ver-30 läuft und Verschiebungen ($\delta x'$, $\delta x''$) der ersten Phasengrenze (11, 12) parallel zu der dritten der Grundabmessungen (A, B, C) erfolgen.
- 7. Modellierverfahren nach Anspruch 6 und einem der Ansprüche 35 dadurch gekennzeichnet, 2 bis 5,

- dass die zweite Phasengrenze (12, 11) als Rechteck mit einer zweiten Längsseite und einer zweiten Querseite ausgebildet ist und
- dass die zweite Längsseite mit der ersten der Grundabmessungen (A, B, C) korrespondiert, die zweite Querseite parallel zur zweiten der Grundabmessungen (A, B, C) verläuft und Verschiebungen ($\delta x''$, $\delta x'$) der zweiten Phasengrenze (12, 11) parallel zur dritten der Grundabmessungen (A, B, C) erfolgen.

- 8. Modellierverfahren nach Anspruch 7,
- dadurch gekennzeichnet, dass die Summe (1) der Querseiten der Phasengrenzen (11, 12) ungefähr gleich dem 1,5- bis 3-fachen eines kritischen Lamellenabstandes (1') ist, bei dem eine Energiebilanz, die einerseits mit dem Verschieben der Phasengrenzen (11, 12) korrespondierende Phasenumwandlungen des Stahls und andererseits mit dem Verschieben der Phasengrenzen (11, 12) korrespondierende Änderungen der Fläche einer Grenzschicht (16) zwischen der ersten und der zweiten weiteren Phase berücksichtigt, ausgeglichen ist.
 - 9. Modellierverfahren nach einem der obigen Ansprüche, da durch gekennzeichnet, dass das Stefan-Problem eindimensional angesetzt und gelöst wird bzw. die Stefan-Probleme eindimensional angesetzt und gelöst werden und dass der Anteil (p3) an Austenit anhand einer nicht linearen Funktion der Lage der Phasengrenze (11, 12) bzw. der Phasengrenzen (11, 12) ermittelt wird.
- 10. Modellierverfahren nach einem der obigen Ansprüche,
 d a d u r c h g e k e n n z e i c h n e t , dass die Ermittlung, in welchen Konzentrationen (k1 bis k4) das mindestens eine bewegliche Legierungselement beidseits der ersten
 Phasengrenze (11, 12) bzw. beidseits der ersten und beidseits
 der zweiten Phasengrenze (11, 12) vorliegt, anhand der
 Gibbsschen freien Enthalpien (G1, G2, G3) der Phasen erfolgt.

- 11. Modellierverfahren nach einem der obigen Ansprüche, da durch gekennzeichnet, dass anhand der im Anfangszustand (ZA) bereits vorhandenen Phasen und anhand der Gibbsschen freien Enthalpien (G1, G2, G3) der Phasen ermittelt wird, ob sowohl Austenit als auch die erste weitere Phase vorliegen bzw. ob zusätzlich zu Austenit und der ersten weiteren Phase auch die zweite weitere Phase vorliegt.
- 10 12. Modellierverfahren nach einem der obigen Ansprüche,
 d a d u r c h g e k e n n z e i c h n e t , dass das
 Stahlvolumen (1) eine Vielzahl von Volumenelementen (9) umfasst, dass das Stefan-Problem bzw. die Stefan-Probleme nur
 für einen Teil der Volumenelemente (9) gelöst wird bzw. werden und dass die lokalen Anteile (p1, p2, p3) der Phasen der
 anderen Volumenelemente (9) anhand der lokalen Anteile (p1,
 p2, p3) der Phasen des Teils der Volumenelemente (9) ermittelt werden.
- 20 13. Modellierverfahren nach Anspruch 12,
 da durch gekennzeichnet, dass die
 Wärmeleitungsgleichung individuell für jedes Volumenelement
 (9) gelöst wird.
 - 14. Modellierverfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 13, dadurch gekennzeichnet,
 - dass dem Rechner (4) ein Erstzustand (Z) und zumindest eine gewünschte Endgröße (f'^*) vorgegeben werden,
- dass das Modellierverfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 10 iterativ angewendet wird,
 - dass der Anfangszustand (ZA) der ersten Iteration dem Erstzustand (Z) und der Anfangszustand (ZA) jeder weiteren Iteration dem unmittelbar zuvor ermittelten Folgezustand (ZF) entspricht und
- dass anhand des nach einer letzten Iteration ermittelten Folgezustands (ZF) eine erwartete Endgröße (f') ermittelt und mit der gewünschten Endgröße (f'*) verglichen wird.

5

10

15

- 15. Modellierverfahren nach Anspruch 14, da durch gekennzeichnet, dass es on-line und in Echtzeit oder offline ausgeführt wird.
- 16. Modellierverfahren nach Anspruch 14 oder 15, da durch gekennzeich hnet, dass die Einflussgrößen (W) der Iterationen in ihrer Gesamtheit einem Einflussgrößenverlauf entsprechen, dass der Rechner (4) aufgrund des Vergleichs der erwarteten Endgröße (f') mit der gewünschten Endgröße (f'*) den Einflussgrößenverlauf variiert und ausgehend vom Erstzustand (Z) das Modellierverfahren nach Anspruch 12 erneut ausführt, bis zumindest die erwartete Endgröße (f') mit der gewünschten Endgröße (f'*) korrespondiert.
- 17. Modellierverfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 13, da durch gekennzeichnet, dass es online und in Echtzeit ausgeführt wird, dass der Rechner (4) anhand einer aus dem Anfangszustand (ZA) ermittelten Anfangsgröße (f) und einer gewünschten Folgegröße (f*) die Einflussgröße (W) ermittelt und dass der Rechner (4) eine Beeinflussungseinrichtung (2) derart ansteuert, dass das Stahlvolumen (1) entsprechend der ermittelten Einflussgröße (W) beeinflusst wird.
 - 18. Datenträger mit einem auf dem Datenträger gespeicherten Computerprogramm (6) zur Durchführung eines Modellierverfahrens nach einem der obigen Ansprüche.
- 19. Rechner mit einem Massenspeicher (8), in dem ein Computerprogramm (6) hinterlegt ist, so dass bei Aufruf des Computerprogramms (6) von dem Rechner ein Modellierverfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 17 ausführbar ist.
- 35 20. Beeinflussungseinrichtung zum Beeinflussen der Temperatur eines Stahlvolumens (1), insbesondere Kühlstrecke,

dadurch gekennzeichnet, dass sie von einem Rechner (4) nach Anspruch 19 gesteuert wird.

21. Stahl,

dadurch gekennzeichnet, dass er eine Beeinflussungseinrichtung (2) nach Anspruch 20 durchlaufen hat, wobei die Einflussgröße (W) nach Anspruch 16 oder 17 ermittelt wurde.

5

10

15

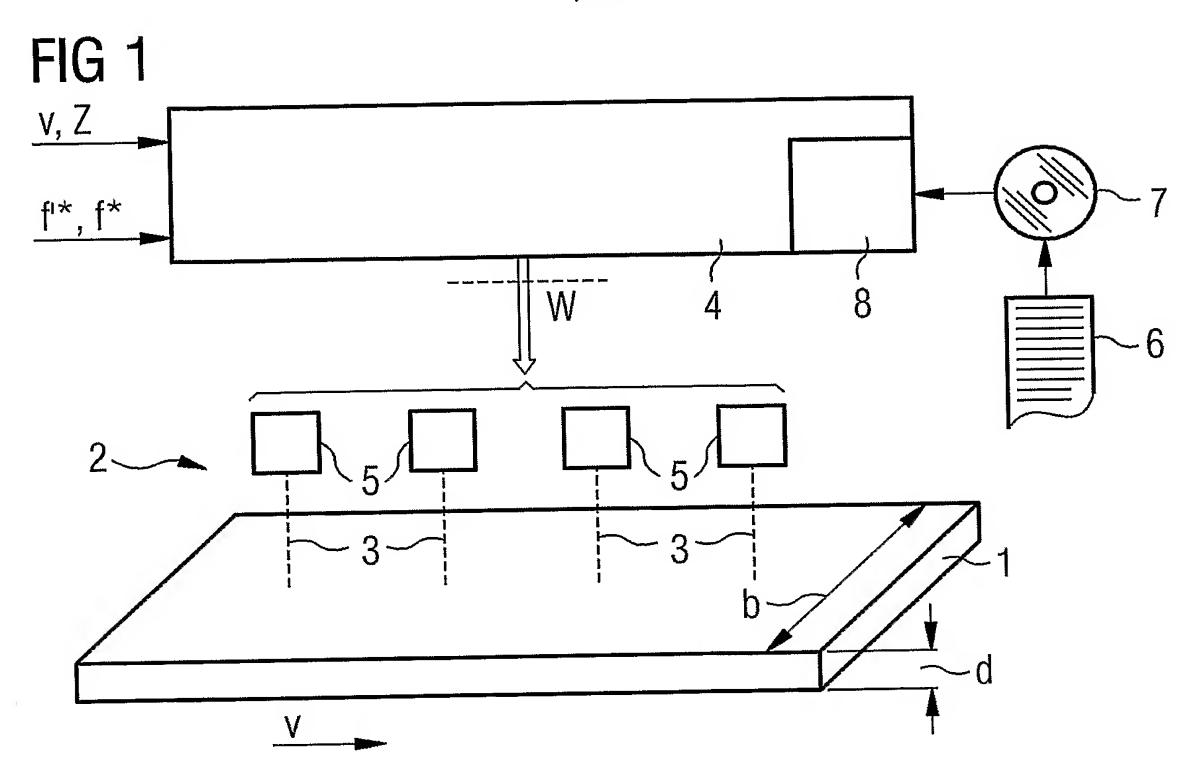
20

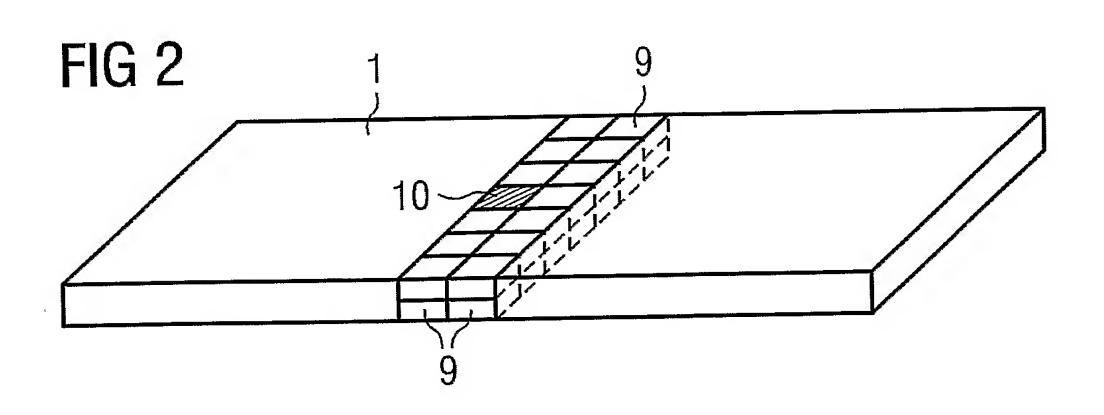
Zusammenfassung

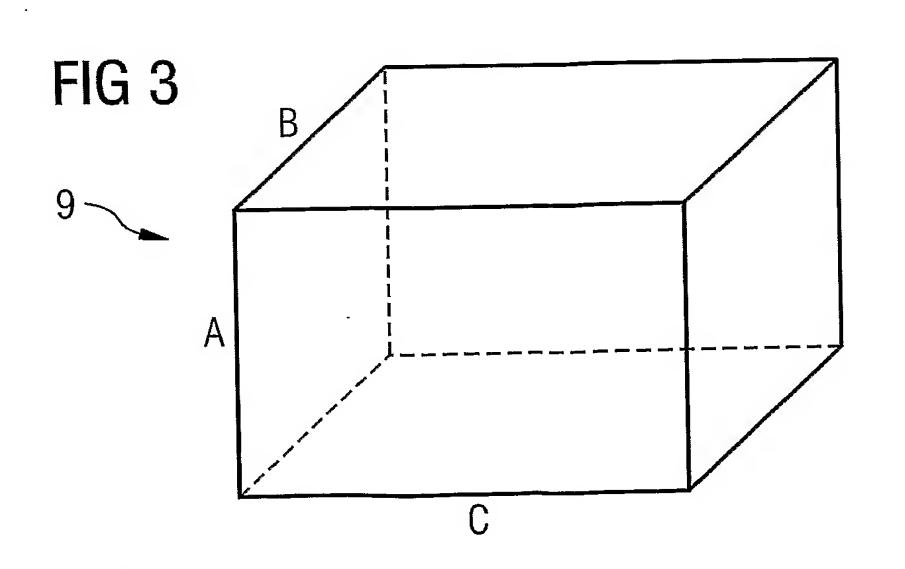
Rechnergestütztes Modellierverfahren für das Verhalten eines Stahlvolumens mit einer Volumenoberfläche

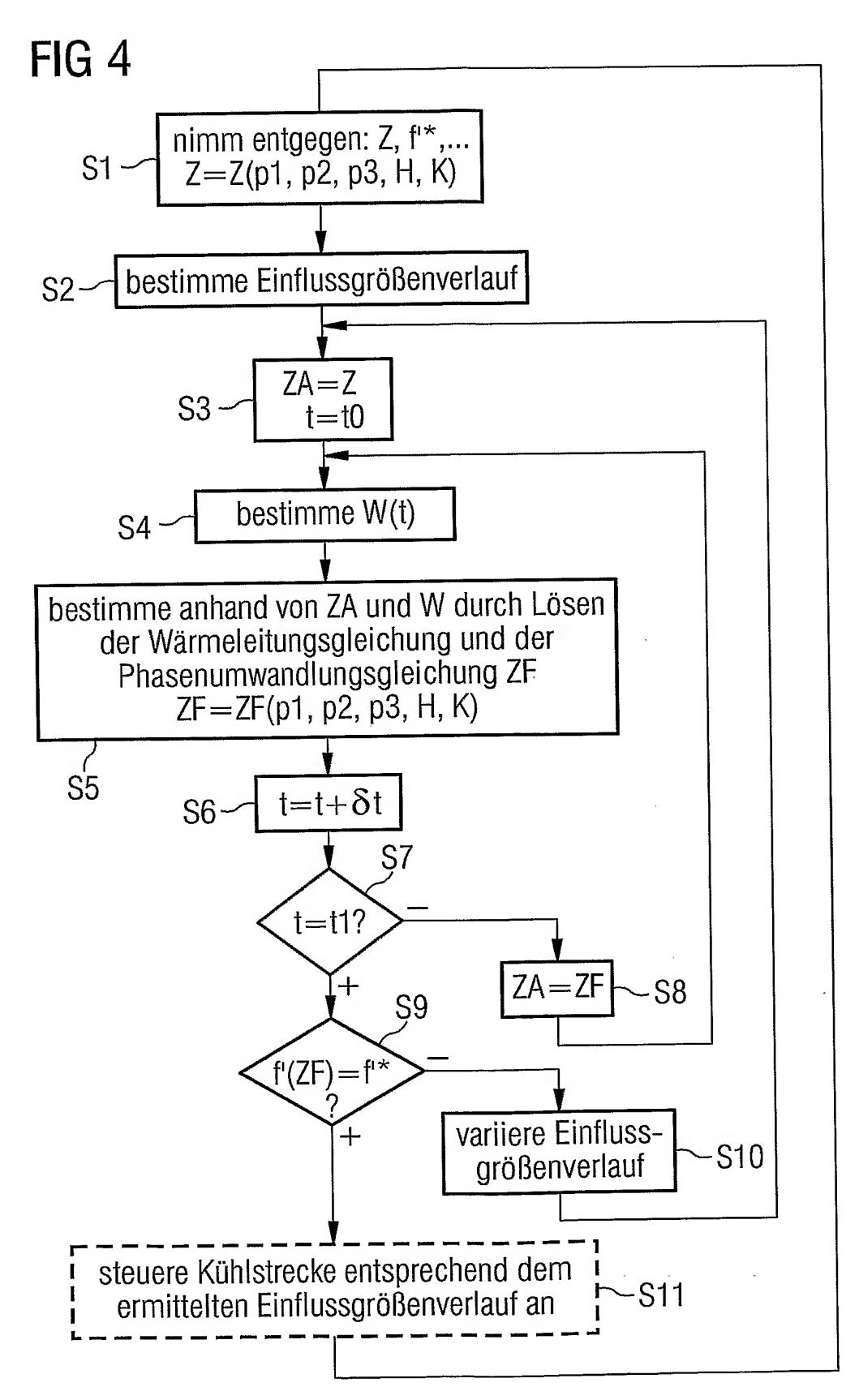
Ein Rechner (4) ermittelt anhand eines momentanen Anfangszustands (ZA) eines Stahlvolumens (1) und mindestens einer über die Volumenoberfläche auf das Stahlvolumen (1) einwirkenden momentanen Einflussgröße (W) durch Lösen einer Wärmeleitungsund einer Phasenumwandlungsgleichung einen Folgezustand (ZF) des Stahlvolumens (1). Die Zustände (ZA, ZF) umfassen für mindestens ein Volumenelement (9) des Stahlvolumens (1) eine lokale Konzentrationsverteilung (K) eines im Stahl beweglichen Legierungselements, lokale Anteile (p1, p2, p3) von modellierten Phasen des Stahls und eine den lokalen Energieinhalt des Stahls beschreibende Größe (H). Die Phasen umfassen Austenit und eine weitere Phase, in der Regel Ferrit oder Zementit. Im Rahmen der Umwandlungsgleichung wird ermittelt, welche Konzentrationen (k1, k3; k2, k4) des beweglichen Legierungselements beidseits einer Phasengrenze (11, 12) zwischen Austenit und der weiteren Phase vorliegen. Ferner wird durch Lösen eines Stefan-Problems ermittelt, ob und wie sich die Konzentrationsverteilung (K) des beweglichen Legierungselements im austenitischen Bereich des betrachteten Volumenelements (9) ändert und ob und um welches Ausmaß ($\delta x'$, $\delta x''$) sich die Phasengrenze (11, 12) dadurch verschiebt. Anhand der Lage der Phasengrenze (11, 12) werden dann die lokalen Anteile (p1, p2, p3) der Phasen ermittelt.

30 FIG 8









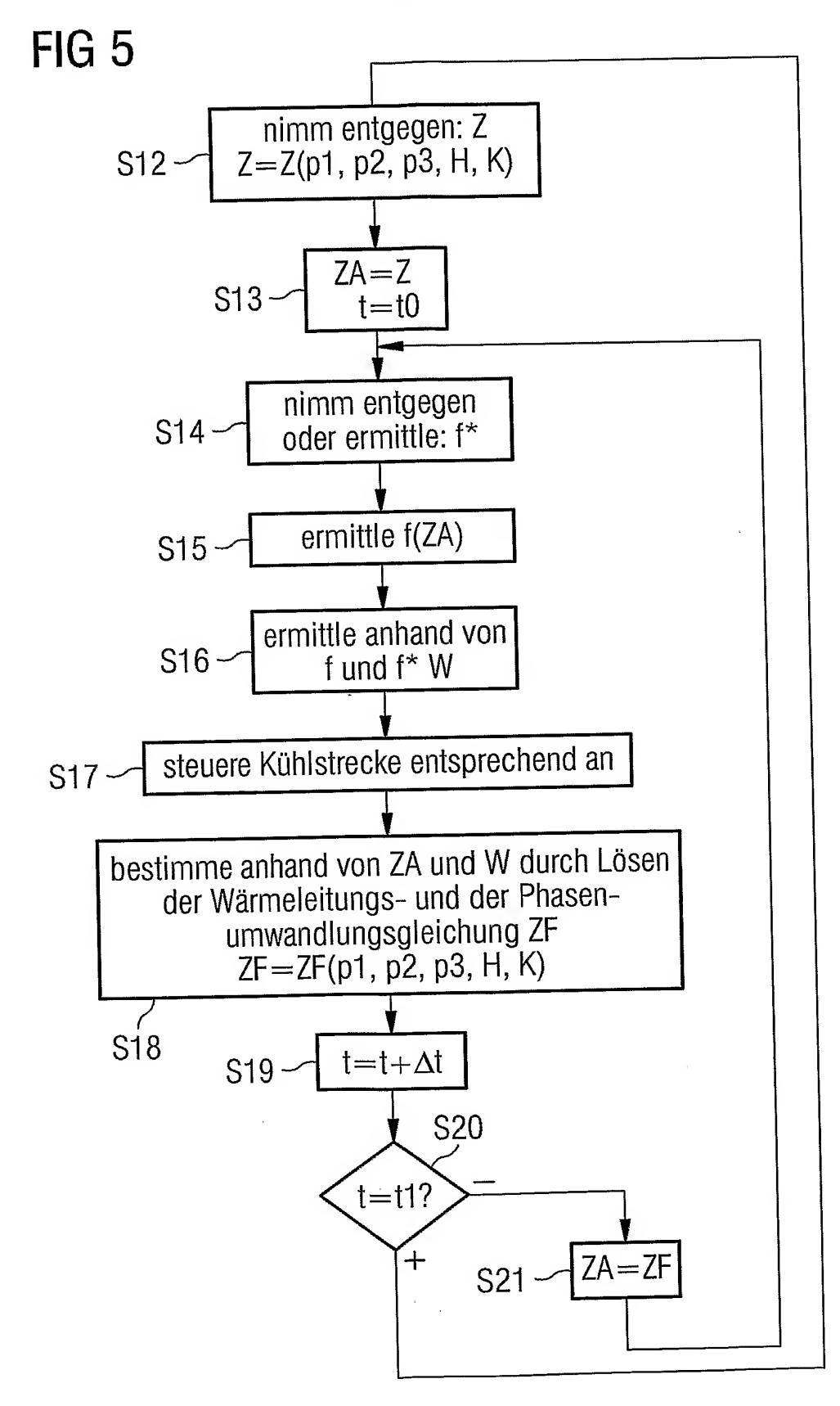


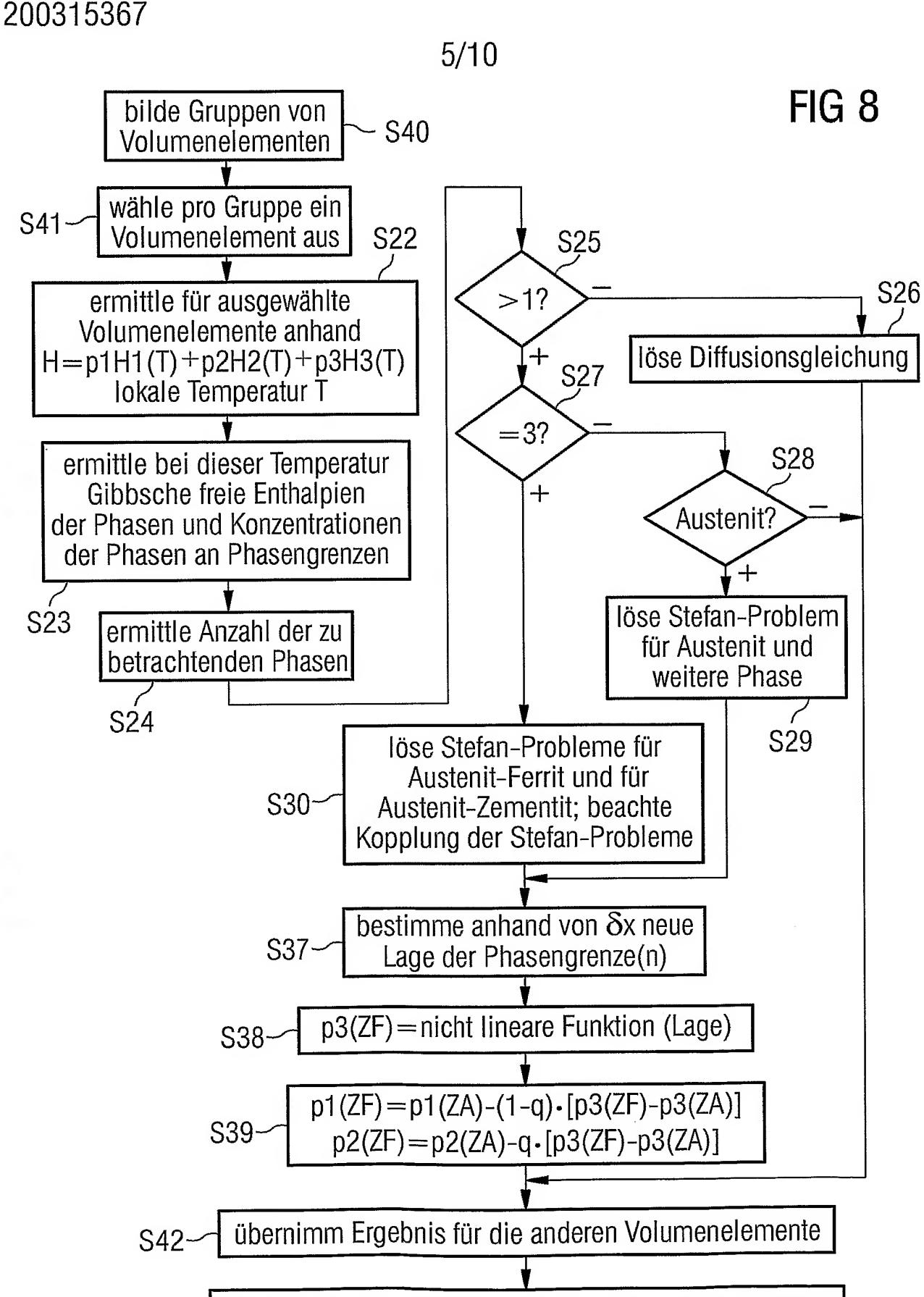
FIG 6

$$ZA \longrightarrow \left[\begin{array}{c} \frac{\partial H}{\partial t} - \text{div} \left[\frac{\lambda H(p1, p2, p3)}{\rho} \cdot \text{gradT}(H, p1, p2, p3) \right] = 0 \\ \frac{\partial p1}{\partial t} = \text{f1}(T, K); \frac{\partial p2}{\partial t} = \text{f2}(T, K); \frac{\partial p3}{\partial t} = \text{f3}(T, K); \end{array} \right] = 0$$

FIG 7

$$ZA \longrightarrow \left[\frac{\partial H}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\lambda H(p1, p2, p3)}{\rho} \cdot \frac{\partial}{\partial x} T(H, p1, p2, p3) \right] = 0 \right]$$

$$ZA \longrightarrow \left[\frac{\partial P1}{\partial t} = f1(T, K); \frac{\partial P2}{\partial t} = f2(T, K); \frac{\partial P3}{\partial t} = f3(T, K); \right]$$



löse Wärmeleitungsgleichung für alle Volumenelemente

FIG 9

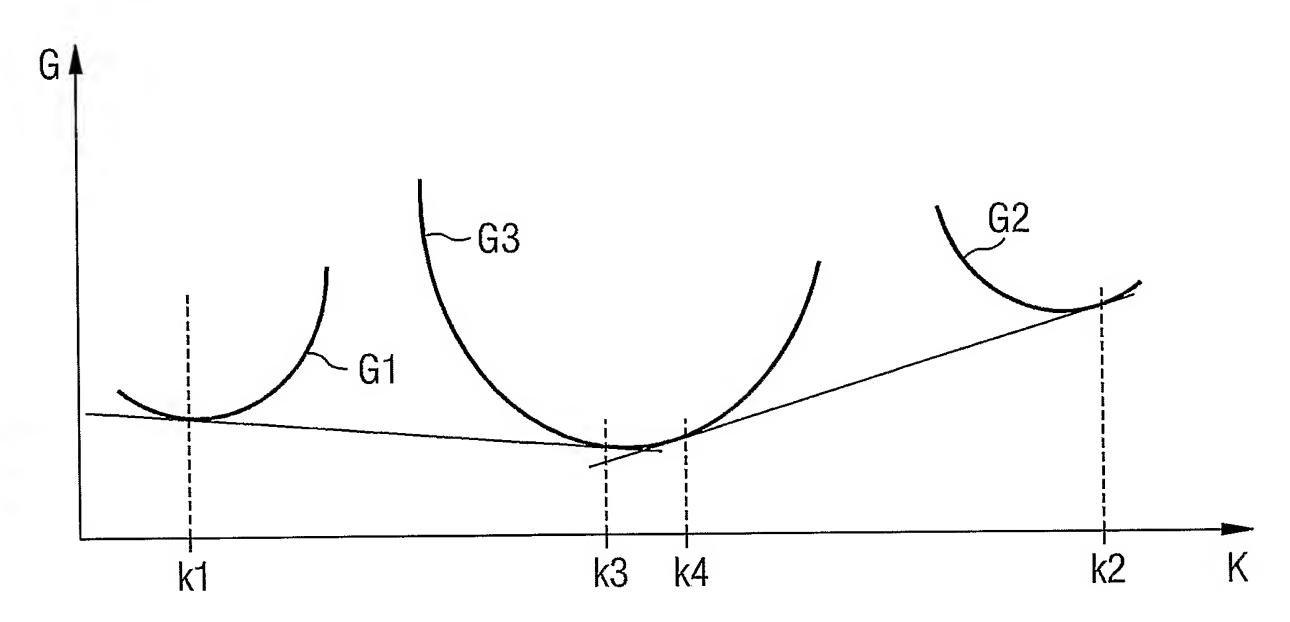
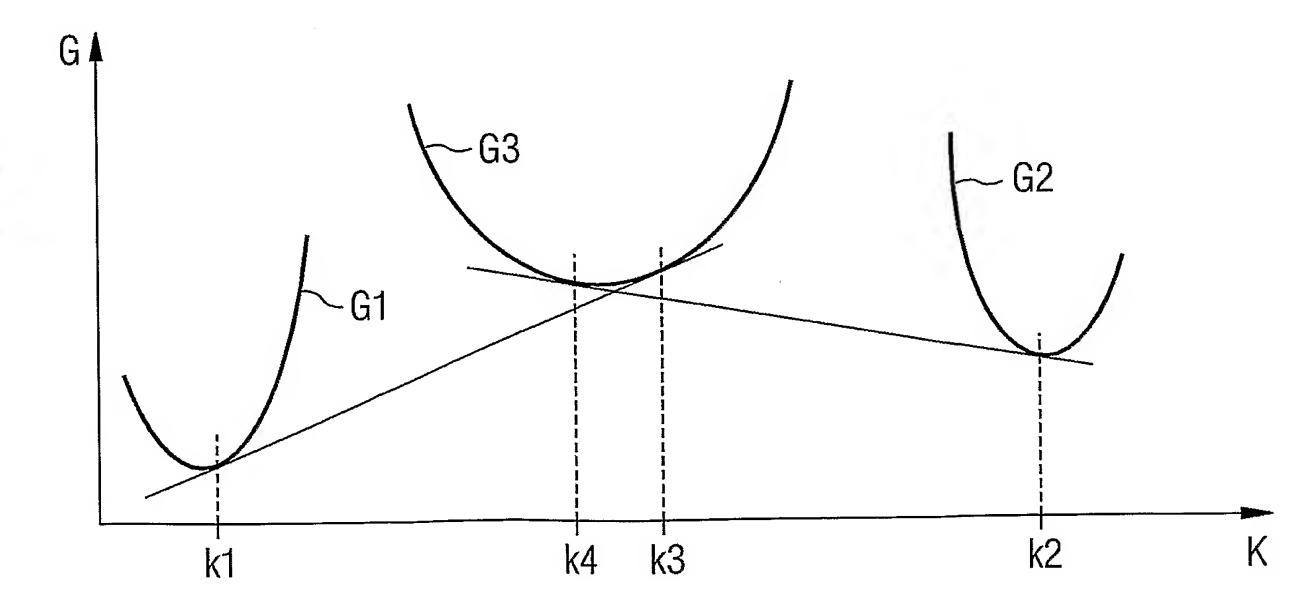


FIG 10



7/10

FIG 11

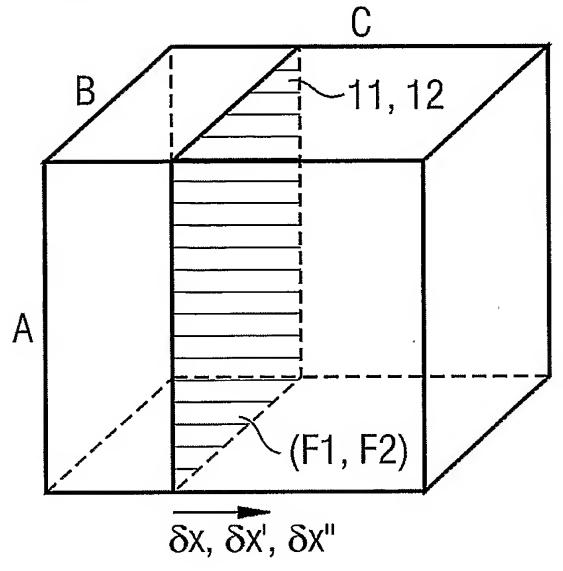


FIG 12

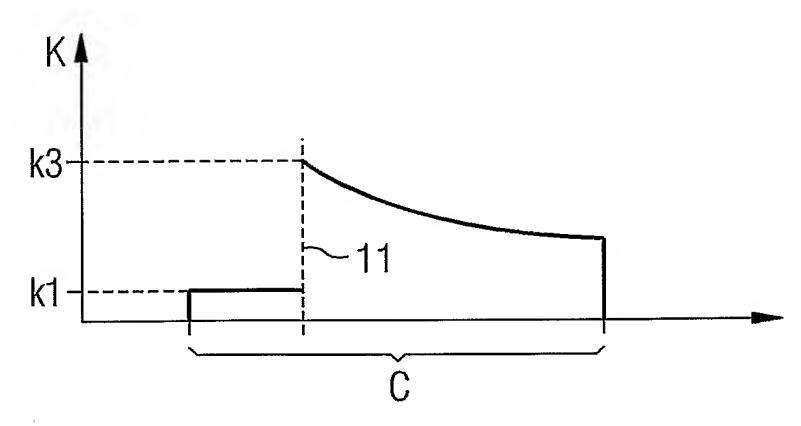
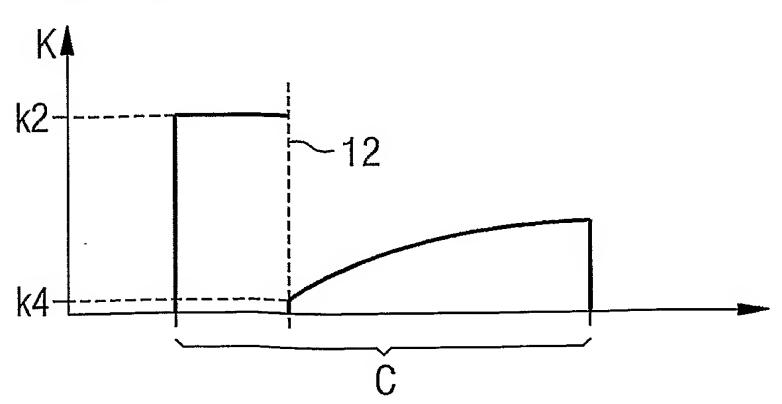
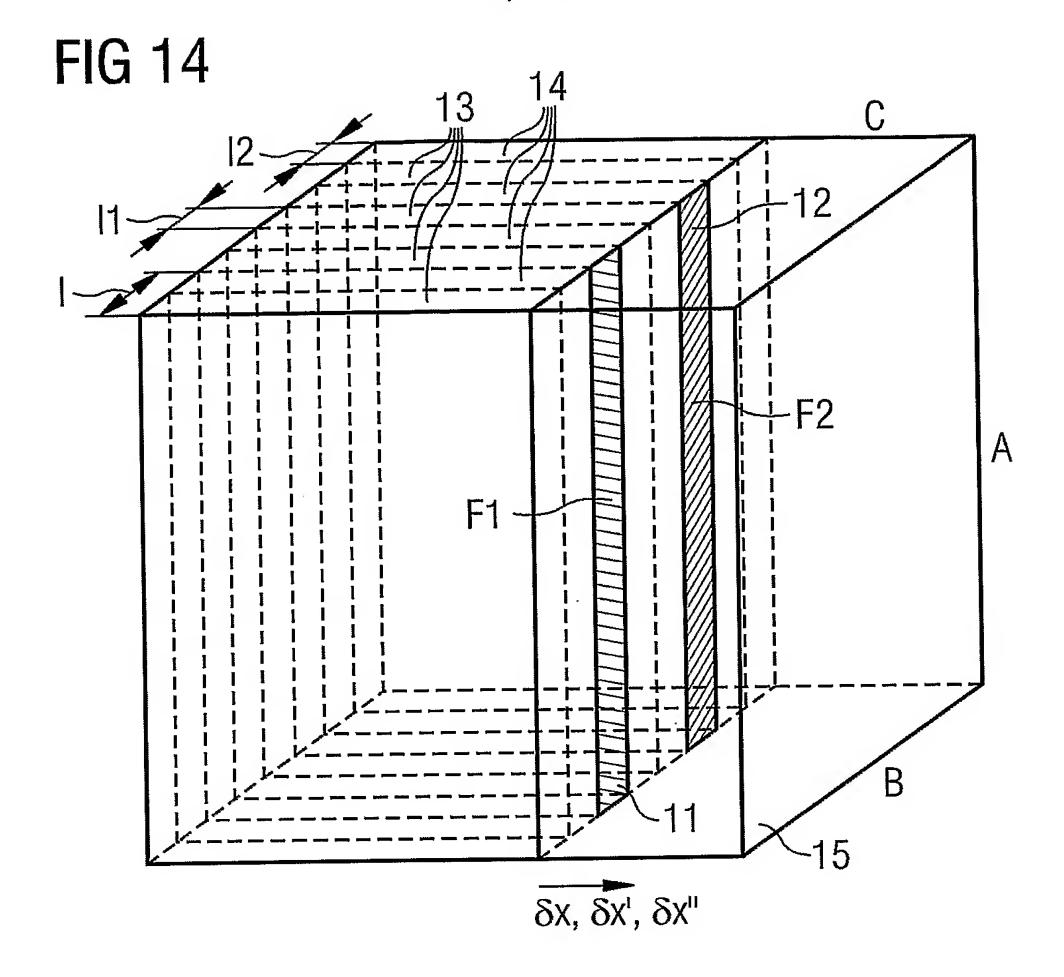


FIG 13





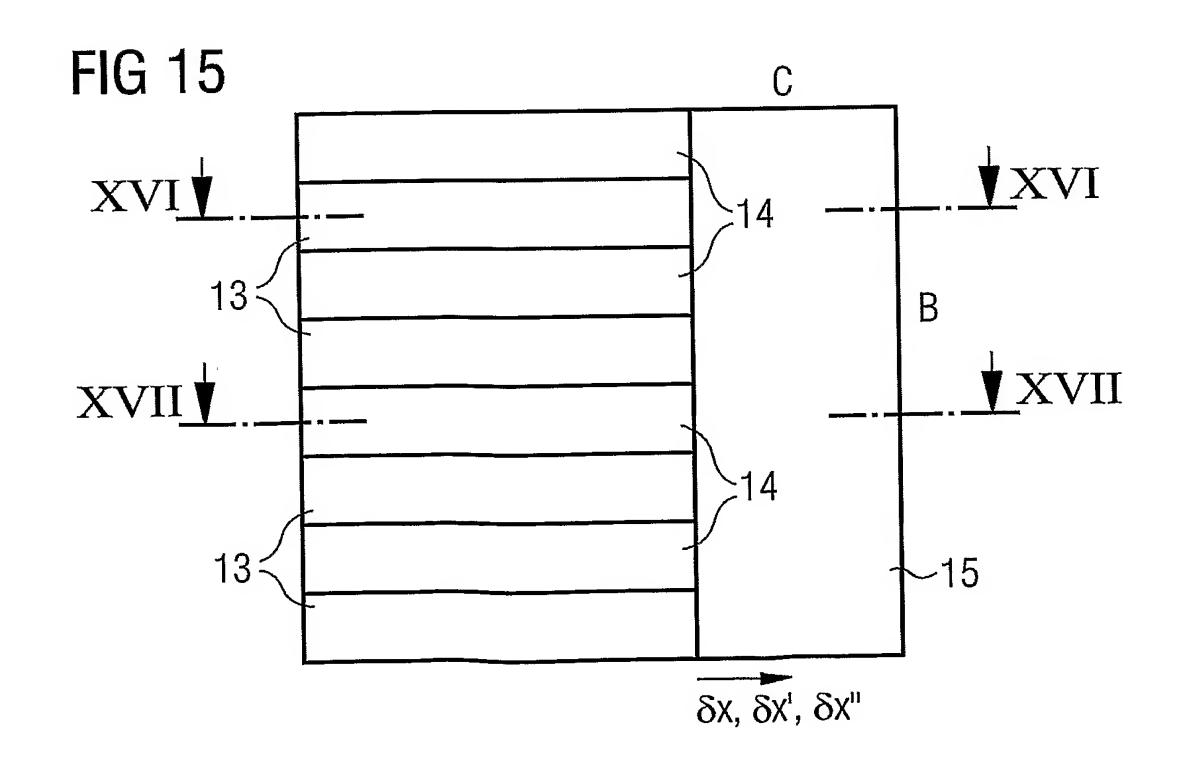


FIG 16

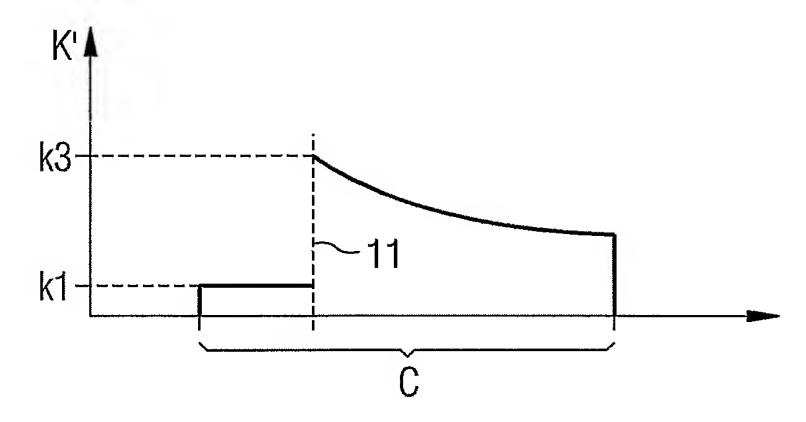


FIG 17

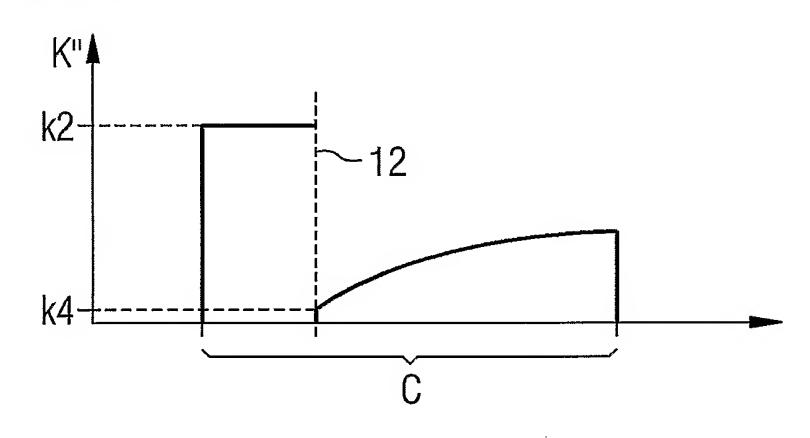


FIG 19

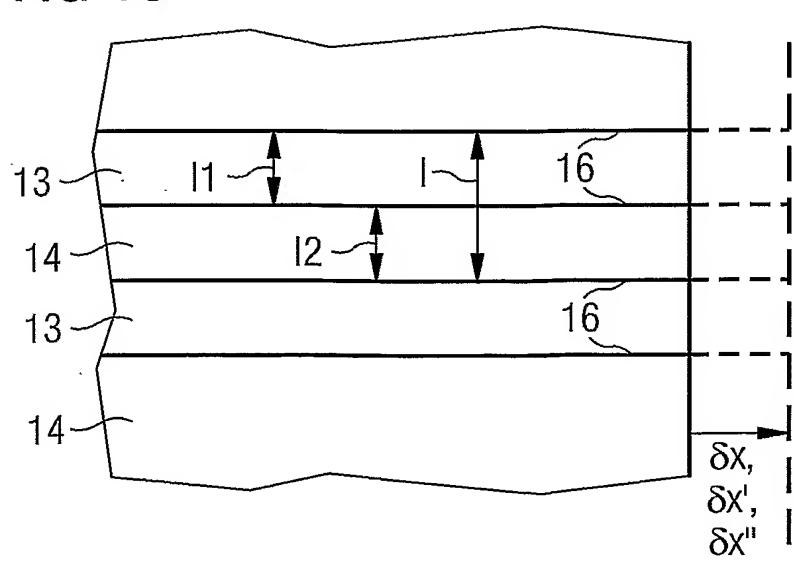


FIG 18

